Computational Learning Theory

Sommersemester 2018

Prof. Dr. Georg Schnitger
AG Theoretische Informatik

Goethe-Universität Frankfurt am Main

Herzlich willkommen!!!

Einführung

Teil I: Statistische Lerntheorie

(a) Das **PAC**-Modell

- **P**robably **A**pproximately **C**orrect (Supervised) Learning.
  - ⋆ eine unbekannte Verteilung D erzeugt klassifizierte Beispiele (also überwachtes Lernen),
  - ⋆ der Lernalgorithmus wird auf D evaluiert.

(b) Die wesentlichen Fragen

- **Beispielkomplexität**
  - ⋆ Wie viele Beispiele sind für ein erfolgreiches Lernen hinreichend und notwendig?
  - ⋆ Die Vapnik-Chervonenkis Dimension.
- **Algorithmische Komplexität**
  - ⋆ Für welche Probleme können Hypothesen effizient bestimmt werden?

Teil II: Online-Lernen

(a) **Gegenbeispiel-Komplexität**

- Ein (bösartiger) Lehrer legt einem Schüler ein Beispiel vor.
- Der Schüler klassifiziert und erhält danach die richtige Antwort.
- Wiederhole, solange bis alle Antworten richtig sind.

(b) **Expertenauswahl**

- **Weighted-Majority**: Experten geben Online Empfehlungen ab. Können wir, ohne den Sachverhalt zu kennen, eine Strategie entwickeln, die fast so gut ist wie der im Nachhinein beste Experte?
- **Winnow**:
  Finde wenige entscheidende aus vielen möglichen Gründen.
- **Perzeptron**:
  Trenne rote von blauen Vektoren im $\mathbb{R}^n$ durch eine Hyperebene.

Teil III: Lernverfahren

(a) Grundlegende Methoden
- Validierung
- Boosting/Bagging
- (stochastischer) Gradientenabstieg

(b) Lernalgorithmen:
- Nearest Neighbor
- **Support Vektor Maschinen**
- **Neuronale Netzwerke**
- Generative Modelle (Maximum Likelihood, Bayes-Netzwerke, Expectation-Maximization).

Worauf wird aufgebaut?

- **Diskrete Modellierung**:
  - Beweisführung: Direkte und indirekte Beweise, vollständige Induktion.
- **Datenstrukturen und Theoretische Informatik 1**:
  - Laufzeitanalyse: O, o, Ω, ω and Rekursionsgleichungen,
  - Graphalgorithmen,
  - NP-Vollständigkeit,
  - Berechenbarkeit.
- **Mathematik 3:**
  - Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie
  - Siehe auch Kapitel 2.4 im Skript.

Literatur

(1) S. Shalev-Shwartz und Shai Ben-David, Machine Learning: From Theory to Algorithms, Cambridge University Press 2014. (*PAC Lernen und Support-Vektor-Maschinen*)

(2) M. Mohri, A. Rostamizadeh und A. Talwalkar, Foundations of Machine Learning, MIT Press 2012. (*PAC Lernen und Support-Vektor-Maschinen*)

(3) I. Goodfellow, Y. Bengio und A. Courville, Deep Learning, MIT Press 2016. (*Lernverfahren, insbesondere Neuronale Netzwerke*)

(4) Skript zur Vorlesung „Computational Learning Theory“, Goethe-Universität Frankfurt, 2018.

Organisatorisches

Die Webseite

http://thi.cs.uni-frankfurt.de/lehre/clt/sose18.de

Die Webseite enthält alle wichtigen Informationen zur Veranstaltung:

- Alle Vorlesungsmateralien (Skript, Folien, Zugang zu Extra-Materalien) finden Sie auf dieser Seite.
- Auch organisatorische Details zum Übungsbetrieb werden beschrieben.
- Unter **Aktuelles** finden Sie zum Beispiel:
  - Anmerkungen zum Übungsbetrieb
  - und gegebenenfalls Anmerkungen zu aktuellen Übungsaufgaben.
- Im **Logbuch** finden Sie Informationen,
  - Beamer-Folien, weitere Referenzen

  zu den einzelnen Vorlesungsstunden.

Prüfungen und Übungsbetrieb

BITTE, BITTE, BITTE aktiv an den Übungen teilnehmen!

- Wöchentliche Übungszettel auf der Webseite mit **Ausgabe am Montag**. Der 1. Übungszettel wird in der 2. Vorlesungswoche ausgegeben.
- **Rückgabe**, nach 1-wöchiger Bearbeitungszeit, **vor der Montag-Vorlesung**. (Rückgabe auch im Briefkasten neben Büro 312 möglich.)
- Wenn die Prüfung bestanden ist:
  - Bei mindestens 50% aller Übungspunkte eine Verbesserung um einen Notenschnitt,
  - bei mindestens 70% eine Verbesserung um zwei Notenschritte.
- Bei nicht zu vielen Teilnehmern werden nur mündliche Prüfungen angeboten, sonst eine Klausur.

BITTE, BITTE, BITTE

1. Bitte helfen Sie mir durch
   - Fragen,
   - Kommentare
   - und Antworten!
2. Die Vorlesung kann nur durch Interaktion interessant werden.
   - Ich muss wissen, wo der Schuh drückt.
3. Sie erreichen mich außerhalb der Vorlesung im Büro 303.
   - Sprechstunde: Mittwochs 10-12.
   - Kommen Sie vorbei.

Studiengänge

- „**Neuer Master Informatik**“ oder „**Master Wirtschaftsinformatik**“:
  - Computational Learning Theory: Grundlagen (5 CP).
    - ★ Die Veranstaltung findet vom 9.04 bis zum 22.05 statt.
  - Computational Learning Theory: Weiterführende Themen (5 CP)
    - ★ Die Veranstaltung findet vom 28.05 bis zum 10.07 statt.
  - Als Veranstaltung vom 9.4 bis zum 10.07 (10 CP).
- „**Alter Master Informatik**“ oder „**Master Bioinformatik**“: Computational Learning Theory (4+2 SWS, 10 CP).

Statistische Lerntheorie: Worum geht's?

Beispiele, Konzepte und Hypothesen

Supervised Learning: Die zentralen Begriffe

Sei X eine nicht notwendigerweise endliche Menge.

(a) Wir nennen X den **Beispielraum**.

(b) Ein **Konzept** c (über X) ist eine Teilmenge von X.

(c) Eine **Hypothese** h (über X) ist ein Konzept (über X) und eine **Hypothesenklasse** $\mathcal{H}$ ist eine Menge von Hypothesen.

(d) Für ein Konzept c ist $x \in X$ ein **positives** Beispiel für c, falls $x \in c$ und ansonsten ein **negatives** Beispiel. Insbesondere ist

$$\{ (x, b) \in X \times \{0, 1\} \,:\, x \in c \iff b = 1 \}$$

die Menge der gemäß c klassifizierten Beispiele.

Die Zielstellung

c ist das unbekannte Konzept.

Der Lernalgorithmus erhält gemäß klassifizierte Beispiele.
Eine Hypothese ist zu bestimmen, die c möglichst gut *erklärt*.

Welche Fragen sind zu klären?

(1) **Was ist Lernen**? Wann erklärt die Hypothese h das Konzept c?
Wann können wir behaupten, dass unsere Hypothese gut ist?

(2) **Algorithmische Komplexität**: Kann eine gute Hypothese bei genügend vielen Beispielen in vertretbarer Zeit gefunden werden?

(3) **Beispielkomplexität**:
Wieviele Beispiele werden für ein erfolgreiches Lernen benötigt?

Anwendungsszenarien

(1) Spracherkennung: Für jedes Audiosignal x und jede Transkription y besteht das Konzept c aus allen Paaren (x, y), so dass y eine legale Transkription für x ist.

(2) Handschriftenerkennung: Für jeden Anwender x und jede Ziffer $z \in \{0, 1, \ldots, 9\}$ besteht das Konzept $c_{x,z}$ aus allen Schriftproben des Anwenders x, die der Ziffer z entsprechen.

(3) Textinterpretation: Nachrichten sind zum Beispiel automatisch einer der Kategorien „Politik, Wirtschaft, Kultur, Sport ...“ zuzuordnen. Jede dieser Kategorien entspricht einem Konzept.

(4) Bilderkennung: Eine Pixelmatrix ist einer Kategorie (wie etwa „Sonnenaufgang, Wüste, Meer, Stadt, ...“) zuzuordnen.

(5) Bestimmung der Funktion von Proteinen:
Sage die Funktion eines Proteins voraus. Proteinfamilien mit ähnlicher Funktion entsprechen Konzepten.

Welche Konzeptklassen sind von besonderem Interesse?

Die Konzeptklasse der monotonen Monome

Eine Wirkung tritt ein, wenn **alle** Eigenschaften aus einer unbekannten Menge $\{i_1, \ldots, i_k\}$ von Eigenschaften erfüllt sind. Beispiele

$$x \in X := \{0,1\}^n$$

sind Vektoren von n Eigenschaften (bzw. Features).

- Die unbekannte Konjunktion $\alpha := x_{i_1} \wedge \cdots \wedge x_{i_k}$ ist zu lernen. Das entsprechende Zielkonzept c_α ist die Menge

$$c_\alpha = \{\, x \in \{0,1\}^n : x \text{ erfüllt } \alpha \,\}.$$

  aller positiven Beispiele.
- Die Konzeptklasse **MONOTON-MONOM**$_n$ besteht aus der Menge aller Konzepte c_α für eine monotone Konjunktion α.

Weitere boolesche Konzeptklassen

- Und wenn allgemeine Monome zu lernen sind?

  Jetzt entsprechen die unbekannten Zielkonzepte der Konzeptklasse **MONOM**$_n$ aller Monome mit den Literalen $x_1, \neg x_1, \ldots, x_n, \neg x_n$.

- Darf es ein wenig mehr sein?

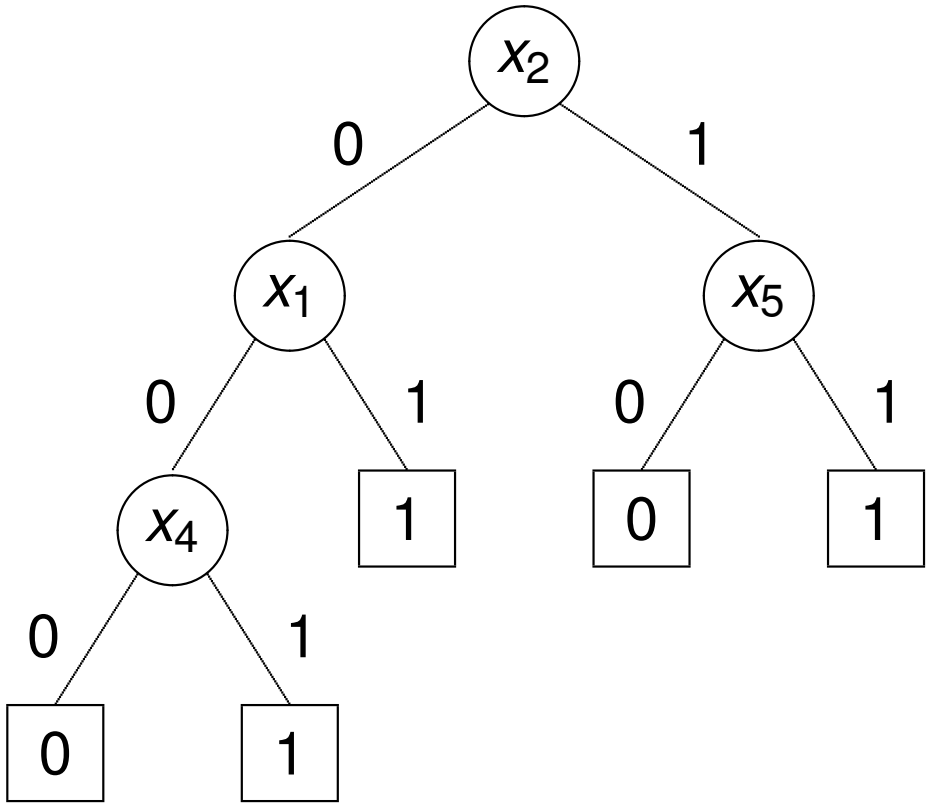
  k-**TERM DNF**$_n$ ist die Konzeptklasse aller DNF-Formeln mit den Literalen $x_1, \neg x_1, \ldots, x_n, \neg x_n$ und höchstens k Monomen.

- Und vielleicht noch ein wenig(?) mehr:

  BOOLEAN$_n$ ist die Konzeptklasse aller booleschen Funktionen $f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$.

Entscheidungsbäume

Die Konzeptklasse **DECISION**$_{n,s}$ hat für jeden Entscheidungsbaum B mit höchstens s Knoten (über den Variablen $x_1, \ldots, x_n$) ein Konzept c_B.



Automaten / Halbräume

AUTOMAT$_{n,\Sigma}$ besitzt für jeden DFA A mit Eingabealphabet Σ und höchstens n Zuständen ein Konzept, nämlichdie von A akzeptierte Sprache $L(A)$.

HALBRAUM$_n$ besitzt für alle Gewichte $w_1, \ldots, w_n \in \mathbb{R}$ und jeden Schwellenwert (bzw. Threshold) $t \in \mathbb{R}$ das Konzept

$$\{ x \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \geqslant t \}$$

HALBRAUM ist unsere erste reellwertige Kozeptklasse.

Halbräume $\Longrightarrow$ neuronale Netzwerke und SVMs

- Die Konzeptklasse der **neuronalen Netzwerke** besteht aus Schaltungen mit „neuronalen Gattern“ der Form $g(\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot y_i - t)$.
  - Zum Beispiel werden das Standard-Sigmoid $g(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$
  - Rectified Linear Units $g(z) = \max\{0, z\}$
  - oder die binäre Threshold-Funktion $g(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$ verwandt.
- In der Methode der **Support Vektor Maschinen** wird eine **Feature-Funktion**

$$\phi : X \to \mathbb{R}^n$$

auf die Beispiele $x_1, \ldots, x_s$ angewandt. Dann wird nach einer Hyperebene gesucht, die – so weit es geht – alle positiven Beispiele $\phi(x_i)$ von den negativen Beispielen $\phi(x_j)$ trennt.

Wichtige Fragestellungen

(1) Wieviele Beispiele werden mindestens benötigt, um eine Chance zu haben die einzelnen Konzeptklassen erfolgreich zu erlernen?
   - Für $\mathbf{MONOM}_n$ sollten sehr viel weniger Beispiele ausreichen als für $\mathbf{BOOLEAN}_n$.
   - Die Beispielzahl sollte von der Anzahl der „Freiheitsgrade“ der Hypothesenklasse abhängen.
   - Wie misst man Freiheitsgrade?

(2) Können wir tatsächlich lernen, wenn genügend viele Beispiele vorhanden sind?

(3) Müssen wir ewig herum experimentieren oder können wir sagen, dass wir zumindest hoch-wahrscheinlich erfolgreich lernen werden?

PAC-Algorithmen

Fehlermessung

- Klassifizierte Beispiele werden zufällig und unabhängig voneinander, gemäß einer unbekannten Verteilung D_1, gezogen.
- Der Lernalgorithmus $\mathcal{L}$ berechnet eine Hypothese h.
- Wie gut ist h? Wir messen den Fehler zwischen dem unbekannten Zielkonzept c und der Hypothese h gemäß einer Verteilung D_2:

$$\text{fehler}_{D_2}(c, h) = \text{prob}[\, c \oplus h \,]$$

(Später betrachten wir allgemeinere Fehlermodelle.)

***Fairness-Bedingung**: Wenn Beispiele nach der Verteilung D_1 erzeugt werden, dann sollte der Fehler auch gemäß D_1 gemessen werden. Wir fordern deshalb*

$$D_1 = D_2.$$

Hochwahrscheinlich approximatives Lernen

Der Anwender gibt einen **Fehlerparameter** ε vor.

- Der Fehler, also der Unterschied zwischen Zielkonzept und Hypothese, soll höchstens ε betragen.
- Aber wenn der Lernalgorithmus *zufälligerweise* wenig informative Beispiele erhält, dann kann die Hypothese i. A. nicht gut sein.

Der Anwender gibt einen **Misstrauensparameter** δ vor und fordert:

*Der Fehler darf mit **Wahrscheinlichkeit** mindestens* $1 - \delta$ *den Fehlerparameter* ε *nicht übersteigen.*

PAC-Algorithmen

PAC Lernen = probably (mit Wahrscheinlichkeit mindestens $1 - \delta$) approximately (mit Fehler höchstens ε) correct.

Wir möchten also hoch-wahrscheinlich approximativ korrekt lernen.

Ein Lernalgorithmus A ist genau dann ein PAC-Algorithmus für eine Konzeptklasse $\mathcal{C}$, wenn **für alle** $\varepsilon \in (0, 1]$, **für alle** $\delta \in (0, 1]$, **für alle Konzepte** $c \in \mathcal{C}$ und **für alle Verteilungen** D

$$\text{prob}_D[\ \text{fehler}_D(c, h_c) \leqslant \varepsilon\ ] \geqslant 1 - \delta$$

gilt, wobei $h_c \in \mathcal{H}$ die von A bestimmte Hypothese ist.

Die Grundstruktur eines PAC-Algorithmus

1. Die Eingabe besteht aus dem *Misstrauensparameter* δ und dem *Fehlerparameter* ε. Die Hypothesenklasse $\mathcal{H}$ sei vorgegeben:

   Ein unbekanntes Konzept c ist mit Hilfe einer Hypothese $h_c \in \mathcal{H}$ zu erlernen.

2. Fordere eine Trainingsmenge $S = \{ (x_1, b_1), \ldots, (x_s, b_s) \}$ von $s = s(\delta, \varepsilon)$ klassifizierten Beispielen an. /* Wie groß ist $s(\varepsilon, \delta)$? */

   /* Es gilt $x_i \in c \iff b_i = 1$ für $1 \leqslant i \leqslant s$. */

3. Bestimme eine Hypothese $h_c \in \mathcal{H}$.

Zentrale Fragen (1/2)

- Fordern wir zuviel?

  In Anwendungen achtet man darauf, dass die Trainingsmenge aus möglichst informativen Beispielen besteht:
  Die Beispielverteilung D ist dann sogar unterstützend.
- Andererseits wäre die Existenz von PAC-Algorithmen A klasse, denn wir können A mit einem Gütesiegel versehen:

  Für jede Verteilung D, falls A mindestens $s(\varepsilon, \delta)$ Beispiele erhält, ist approximativ korrektes Lernen hoch-wahrscheinlich.

Zentrale Fragen (2/2)

- Wie groß ist die Beispielzahl $s(\varepsilon, \delta)$ in Abhängigkeit vom erlaubten Fehler ε und vom Vertrauensparameter δ?
- Angenommen, A ist ein PAC-Algorithmus mit Fehler ε and Vertrauensparameter δ.
  - Um wieviel steigt die Beispielzahl und Laufzeit an, wenn δ durch δ' mit $0 < \delta' \leqslant \delta$ ersetzt wird?
  - Um wieviel steigt die Beispielzahl und Laufzeit an, wenn ε durch ε' mit $0 < \varepsilon' \leqslant \varepsilon$ ersetzt wird?

Konsistente Hypothesen

Ein Lernalgorithmus für $\mathbf{MONOM}_n$

(1) Bestimme $s = s_n(\varepsilon, \delta)$ und fordere s Beispiele an.

(2) Die erste vorläufige Hypothese ist das Monom

$$h \equiv x_1 \wedge \neg x_1 \wedge x_2 \wedge \neg x_2 \wedge \cdots \wedge x_n \wedge \neg x_n.$$

(3) Streiche jedes Literal, das irgendeinem positiven Beispiel widerspricht.

(4) Gib die resultierende Hypothese aus.

h ist mit allen Beispielen konsistent

(1) Das Literal x_j (bzw. $\neg x_j$) wird entfernt, falls ein positives Beispiel diesem Literal widerspricht.

(2) $\Longrightarrow$ Wir bestimmen das ***längste*** mit allen positiven Beispielen konsistente Monom h.

(3) Ist y ein negatives Beispiel und ist M das unbekannte Zielmonom, dann
- gibt es i, so dass das Literal x_i (bzw. $\neg x_i$) in M vorkommt,
- und x_i (bzw. $\neg x_i$) verwirft das negative Beispiel y.

Da h das längste mit allen positiven Beispielen konsistente Monom ist, kommt x_i (bzw. $\neg x_i$) in h vor und h verwirft y.

Wir zeigen jetzt, dass unser Algorithmus ein PAC-Algorithmus für die Konzeptklasse MONOM_n ist, falls

$$s_n(\varepsilon, \delta) = \lceil \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right) + \frac{\ln(3^n)}{\varepsilon} \rceil.$$

PAC-Algorithmen für endliche Konzeptklassen

Konzepte einer Klasse $\mathcal{C}$ von endlich vielen Konzepten sind zu lernen.
Vertrauensparameter δ und Fehlerparameter ε sind vorgegeben.

(1) Setze $s = \lceil \frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(\ln |\mathcal{C}| + \ln \left(\frac{1}{\delta} \right) \right) \rceil$.

(2) Wähle **irgendein** Konzept $h \in \mathcal{C}$ als Hypothese, das mit allen s Beispielen **konsistent** ist.
/* Eine Hypothese h ist genau dann konsistent, wenn h alle positiven Beispiele akzeptiert und alle negativen Beispiele verwirft.

Für MONOM_n genügen, wie versprochen, $\lceil \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln \left(\frac{1}{\delta} \right) + \frac{\ln(3^n)}{\varepsilon} \rceil$ Beispiele.

Die Analyse (1/3)

Behauptung: Wir erhalten einen PAC-Algorithmus, wenn $s = \lceil \frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(\ln |\mathcal{C}| + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right) \rceil$ Beispiele angefordert werden.

- Wir müssen für jedes Konzept $c \in \mathcal{C}$ und jede Verteilung D

$$\text{prob}_D[\ \text{fehler}_D(c, h_c) \leqslant \varepsilon\ ] \geqslant 1 - \delta$$

nachweisen.

- Sei $p = \text{prob}_D[\ \text{fehler}_D(c, h_c) > \varepsilon\ ]$. Dann ist

$$\begin{aligned} p &\leqslant \text{prob}[\ \text{Es gibt eine konsistente Hypothese } h \text{ mit } \text{fehler}_D(c,h) > \varepsilon\ ] \\ &\leqslant \sum_{h \in \mathcal{C} \text{ mit } \text{fehler}_D(c,h) > \varepsilon} \text{prob}[\ h \text{ ist konsistente Hypothese }]. \end{aligned}$$

Die Analyse (2/3)

- Wenn $h \in \mathcal{C}$ eine Hypothese mit großem Fehler ist (also $\text{fehler}_D(c, h) > \varepsilon$), dann wird h ein zufällig gezogenes Beispiel mit Wahrscheinlichkeit höchstens $1 - \varepsilon$ richtig klassifizieren.
- Also ist

$$\begin{aligned} p &\leqslant \sum_{h \in \mathcal{C} \text{ mit } \text{fehler}_D(c,h) > \varepsilon} \text{prob}[h \text{ ist eine konsistente Hypothese }] \\ &\leqslant \sum_{h \in \mathcal{C} \text{ mit } \text{fehler}_D(c,h) > \varepsilon} (1-\varepsilon)^s \leqslant \sum_{h \in \mathcal{C}} (1-\varepsilon)^s = |\mathcal{C}| \cdot (1-\varepsilon)^s. \end{aligned}$$

- Es ist $p = \text{prob}_D[\ \text{fehler}_D(c, h_c) > \varepsilon\ ]$. Wir müssen $p \leqslant \delta$ fordern!

Die Analyse (3/3)

- Wir müssen

$$|\,\mathcal{C}\,| \cdot (1-\varepsilon)^s \leqslant \delta$$

erfüllen.

- Logarithmiere beide Seiten der Ungleichung:

$$\ln|\,\mathcal{C}\,| + s \cdot \underbrace{\ln(1-\varepsilon)}_{\leqslant -\varepsilon} \leqslant \ln\delta.$$

(Es ist $\ln(1-\varepsilon) \leqslant -\varepsilon$. Warum? ▸)

- Somit reicht der Nachweis von $\ln|\,\mathcal{C}\,| - s \cdot \varepsilon \leqslant \ln\delta$. Diese Ungleichung ist äquivalent zu

$$\frac{1}{\varepsilon}\,(\ln|\,\mathcal{C}\,| - \ln\delta) \leqslant s$$

und das war zu zeigen.

Weitere Anwendungen

(a) $\text{Beispiel}(\text{MONOTON-MONOM}_n) = O(\frac{n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$,

$\text{Beispiel}(\text{MONOM}_n) = O(\frac{n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(b) $\text{Beispiel}(k\text{-KNF}_n) = O(\frac{n^k}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$ für festes k,

$\text{Beispiel}(k\text{-DNF}_n) = O(\frac{n^k}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$ für festes k.

(c) $\text{Beispiel}(k\text{-KLAUSEL-KNF}_n) = O(\frac{k \cdot n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$,

$\text{Beispiel}(k\text{-TERM-DNF}_n) = O(\frac{k \cdot n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(d) $\text{Beispiel}(\text{KNF}_n) = O(\frac{1}{\varepsilon} \cdot 2^n + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$,

$\text{Beispiel}(\text{DNF}_n) = O(\frac{1}{\varepsilon} \cdot 2^n + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$,

$\text{Beispiel}(\text{BOOLEAN}_n) = O(\frac{1}{\varepsilon} \cdot 2^n + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(e) $\text{Beispiel}(\text{SYM}_n) = O(\frac{n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(f) $\text{Beispiel}(\text{AUTOMAT}_{n,\Sigma}) = O(\frac{n}{\varepsilon} \cdot |\Sigma| \cdot \log_2 n + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

Diskussion

Die Beispielzahl $s = \lceil \frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(\ln |\mathcal{C}| + \ln \left(\frac{1}{\delta} \right) \right) \rceil$.

! Eine große Verläßlichkeit, also ein kleines δ, kann billig erzielt werden, denn die Beispielanzahl wächst nur logarithmisch mit $1/\delta$.

! Ein kleiner Fehler, also ein kleines ε, ist teuer, denn $1/\varepsilon$ geht linear in der Beispielanzahl ein.

? Könnte

$$\ln |\mathcal{C}|$$

eine Definition der Anzahl der Freiheitsgrade sein?

- Nur wenn die Schranke für s scharf ist.
- Was tun für Konzeptklassen mit unendlich vielen Konzepten?

? Unser PAC-Algorithmus wählt eine **konsistente** Hypothese.

- Wie bestimmt man konsistente Hypothesen effizient?
- Und wenn es keine effizienten Hypothesen gibt?

Was tun bei unendlich vielen Konzepten?

(Allerdings pessimistische) Schranken für die Beispielzahl:

- Konzepte aus **HALBRAUM**$_n$ werden durch $n+1$ Parameter beschrieben: Die n Koeffizienten und der eine Schwellenwert.
- Für die Darstellung einer Gleitkommazahl genügen c Bits: Die Anzahl der im Rechner darstellbaren Halbräume ist $\leqslant 2^{c(n+1)}$

$$\Longrightarrow \left\lceil \frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(c \cdot (n+1) \ln 2 \; + \ln \left(\frac{1}{\delta} \right) \right) \right\rceil$$

klassifizierte Beispiele reichen, um den wahren Fehler ε mit Wahrscheinlichkeit mindestens $1-\delta$ nicht zu überschreiten.

Der genaue Wert von c ist rechner-abhängig.
Für präzise Schranken der Beispielzahl benötigen wir neue Ideen.

Das ERM-Problem

Empirische Risiko Minimierung (ERM) (1/3)

Wir möchten ein unbekanntes Konzept c mit der Hypothesenklasse $\mathcal{H}$ lernen und fordern klassifizierte Beispiele $(x_1, b_1), \ldots, (x_s, b_s)$ an.

Empirische Risiko Minimierung: Bestimme eine Hypothese $h_c \in \mathcal{H}$, so dass das **empirische Risiko** bzw. der **empirische Fehler**

$$|\{ i \ : \ 1 \leqslant i \leqslant s, h_c(x_i) \neq b_i \}|$$

minimal ist. (Wenn möglich, bestimme konsistente Hypothesen.)

- Achtung, droht **Overfitting** (bzw. Auswendiglernen)?
  - Die vielen „Freiheitsgrade“ der Hypothesenklasse werden nur teilweise durch die Beispiele gesetzt.
- Oder **Underfitting**?
  - Die Hypothesenklasse hat zu wenige Freiheitsgrade.
  - Die Beispielmenge ist auch näherungsweise nicht erklärbar.

Empirische Risiko Minimierung (ERM) (2/3)

(a) Die Hypothesenklasse sollte möglichst wenige,

(b) aber genügend viele Freiheitsgrade besitzen

um einen **kleinen empirischen** Fehler und damit auch einen **kleinen wahren Fehler** zu garantieren.

Empirische Risiko Minimierung (ERM) (3/3)

Sei $\mathcal{H}$ eine Hypothesenklasse über einer Menge X von Beispielen.

(a) Im **ERM-Problem** für die Beispielmenge

$$S = \{(x_1, b_1), \ldots, (x_s, b_s)\} \subseteq X \times \{0, 1\}$$

ist eine Hypothese $h_S \in \mathcal{H}$ zu bestimmen, die den empirischen Fehler (bzw. das empirische Risiko)

$$|\{\, i \;:\; 1 \leqslant i \leqslant s, h_S(x_i) \neq b_i \,\}|$$

unter allen Hypothesen in $\mathcal{H}$ **minimiert**. Wir nennen h_S eine **ERM-Hypothese**.

(b) Ein **ERM-Algorithmus** für $\mathcal{H}$ ist ein Lernalgorithmus, der nur ERM-Hypothesen für $\mathcal{H}$ ausgibt.

(Später messen wir den Fehler auch auf andere Arten.)

Inkonsistente Hypothesen

Konsistente Hypothesen: Kritik

- In den meisten Anwendungen können wir nicht davon ausgehen, dass das Zielkonzept auch in der Hypothesenklasse liegt:

  Die Schriftproben einer bestimmten Person werden wir nur approximativ, aber nicht exakt erkennen können!

- Stattdessen sollten wir annehmen, dass es zu jedem Zielkonzept $c \in \mathcal{C}$ eine Hypothese $h \in \mathcal{H}$ mit kleinem Fehler gibt, d.h. dass gilt

$$\text{fehler}_D(c, h) \leqslant \varepsilon.$$

Der Lernalgorithmus:

(1) Bestimme die Beispielzahl s in Abhängigkeit von ε und δ.

(3) Wähle *irgendeine* Hypothese $h \in \mathcal{H}$, die mit mindestens $(1 - 2\varepsilon) \cdot s$ Beispielen konsistent ist. Gib eine Fehlermeldung aus, wenn eine solche Hypothese nicht existiert.

Das Ziel

Bestimme die Beispielzahl s so, dass gilt

$$\text{prob}_D[\ \begin{array}{l}\text{Algorithmus findet eine Hypo–}\\ \text{these } h_c \text{ mit fehler}_D(c, h_c) \leqslant 4\varepsilon\end{array}\ ] \geqslant 1 - \delta$$

- Zwei Fehlerquellen: Es gibt keine „fast konsistenten“ Hypothesen (Fehlermeldung) oder der Fehler ist zu groß.
- Bestimme s, so dass

$$\begin{aligned}\text{prob}_D[\text{ Algorithmus gibt eine Fehlermeldung }] &\leqslant \frac{\delta}{2} \text{ und}\\ \text{prob}_D[\text{ fehler}_D(c, h_c) \geqslant 4\varepsilon\ ] &\leqslant \frac{\delta}{2}\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit einer Fehlermeldung (1/2)

Die Situation: Es gibt eine Hypothese $h \in \mathcal{H}$ mit $\text{fehler}_D(c, h) \leqslant \varepsilon$, aber keine Hypothese ist mit mindestens $(1 - 2\varepsilon) \cdot s$ Beispielen konsistent.

- h ist also mit mehr als $2\varepsilon \cdot s$ Beispielen inkonsistent.
- Wenn wir aber s Beispiele zufällig ziehen, dann ist die erwartete Anzahl der durch h falsch klassifizierten Beispiele höchstens

$$\varepsilon \cdot s.$$

- Im Falle einer Fehlermeldung verstoßen wir signifikant gegen den Erwartungswert: Statt Inkonsistenz mit höchstens $\varepsilon \cdot s$ Beispielen sogar Inkonsistenz mit mehr als $2\varepsilon \cdot s$ Beispielen.

Ein heftiger Verstoß gegen den Erwartungswert sollte doch sehr unwahrscheinlich sein!

Die Wahrscheinlichkeit einer Fehlermeldung (2/2)

Wir liegen mit $2\varepsilon s$ zweifach über dem Erwartungswert und die Chernoff-Schranke für $\beta = 1$ liefert

$$e^{-\frac{\varepsilon s}{3}}.$$

als Wahrscheinlichkeit einer Fehlermeldung.

- Wir müssen die Wahrscheinlichkeit einer Fehlermeldung durch $\delta/2$ nach oben beschränken.
- Wir fordern

$$s \geqslant \frac{3}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{2}{\delta}\right).$$

Zu große Fehler (1/2)

- Sei $h \in \mathcal{H}$ eine beliebige Hypothese mit zu großem Fehler, also $\text{fehler}_D(c, h) \geqslant 4 \cdot \varepsilon$.
- Ist es nicht dann unwahrscheinlich, dass h mit höchstens $2\varepsilon \cdot s$ Beispielen inkonsistent ist?

  Mehr als $4\varepsilon \cdot s$ inkonsistente Beispiele sind zu erwarten.
- Chernoff liefert für $\beta = 1/2$

$$p = \text{prob}_D[\ \begin{array}{l} h \text{ ist mit höchstens } 2\varepsilon s \\ \text{Beispielen nicht konsistent} \end{array}\ ] \leqslant e^{-\frac{4\varepsilon \cdot s}{4 \cdot 2}} = e^{-\frac{\varepsilon \cdot s}{2}}$$

Zu große Fehler (2/2)

Für die Wahrscheinlichkeit q eines zu großen Fehlers gilt:

$$q \leqslant \sum_{h \in \mathcal{H} \text{ mit } \text{fehler}_D(c,h) \geqslant 4\varepsilon} \text{prob}_D[\ \begin{array}{l} h \text{ ist mit} \leqslant 2\varepsilon s \text{ Beispielen} \\ \text{nicht konsistent} \end{array}\ ]$$

- Also

$$q \leqslant \sum_{h \in \mathcal{H}} e^{-\frac{\varepsilon s}{2}} = |\,\mathcal{H}\,| \cdot e^{-\frac{\varepsilon s}{2}}.$$

- Um $q \leqslant \delta/2$ zu erhalten, fordere $|\,\mathcal{H}\,| \cdot e^{-\frac{\varepsilon s}{2}} \leqslant \delta/2$.
- Nach logarithmieren folgt $\ln |\,\mathcal{H}\,| - \frac{\varepsilon s}{2} \leqslant \ln\left(\frac{\delta}{2}\right)$ und äquivalent

$$\frac{2}{\varepsilon} \cdot \left[\ln |\,\mathcal{H}\,| + \ln\left(\frac{2}{\delta}\right)\right] \leqslant s.$$

Zusammenfassung

Wir erreichen $\text{fehler}_D(c, h) \leqslant 4\varepsilon$ mit Wahrscheinlichkeit mindestens $1 - \delta$, falls es eine Hypothese h' mit $\text{fehler}_d(c, h') \leqslant \varepsilon$ gibt und falls

$$s(\delta, \varepsilon) \geqslant \frac{3}{\varepsilon} \cdot \left[\ln | \mathcal{H} | + \ln \left(\frac{2}{\delta} \right) \right].$$

Die Beispielzahl steigt, im Vergleich zur garantierten Existenz konsistenter Lösungen nur moderat an!

? Sind die Schranken für die Beispielzahl scharf?

Sind $\ln(|\mathcal{C}|)$, bzw. $\ln(|\mathcal{H}|)$ gute Messungen der Anzahl der Freiheitsgrade von Konzept- bzw. Hypothesenklasse?

? Wie bestimmt man (fast-)konsistente Hypothesen?

Das agnostische PAC-Modell

Es wäre schön, wenn wir

1. Klassen $\mathcal{C}$ von Funktionen

$$f : X \to Y$$

mit **beliebigem** Wertebereich Y lernen könnten (bisher $|Y| = 2$),

2. Verteilungen D auf

$$X \times Y$$

zulassen könnten. (Bisher ist D nur auf dem Beispielraum X definiert.)

- Wir kennen das äußeren Erscheinungsbild x einer Frucht.
- Was sind die „*Schmeckt-lecker-Wahrscheinlichkeiten*“

$$\text{prob}_D[\text{ Beispiel} = x,\ y = 1\ ]?$$

Loss-Funktionen

Loss-Funktionen und erwarteter Loss

Sei $\mathcal{H}$ eine Hypothesenklasse

(a) Eine Funktion der Form

$$\ell : \mathcal{H} \times X \times Y \to \mathbb{R}_{\geqslant 0}$$

wird als **Loss-Funktion** bezeichnet.

- Der 0-1 Loss $\ell(h, x, y) = \begin{cases} 0 & h(x) = y \\ 1 & h(x) \neq y, \end{cases}$ bestraft, wenn $h(x)$ von y verschieden ist,
- der quadratische Loss $\ell(h, x, y) := (h(x) - y)^2$ bestraft große Abweichungen von y.

(b) Der **erwartete Loss** einer Hypothese $h \in \mathcal{H}$ (bzgl. D und ℓ) ist

$$\text{Loss}_D(h) := \mathbb{E}_{(x,y)\sim D}[\,\ell(h, x, y)\,].$$

($\text{Loss}_D(h)$ verallgemeinert unsere Definition von $\text{fehler}_D(c, h_c)$.)

0-1 Loss

Sei ℓ der 0-1 Loss.

(a) Für eine Zielfunktion $f : X \to Y$ und eine Hypothese $h : X \to Y$ ist

$$\text{Loss}_D(h) = \mathbb{E}_{(x,y)\sim D}[\,\ell(h,x,y)\,] = \text{prob}_{(x,y)\sim D}[\,h(x)\neq y\,].$$

- Die Verteilung D kann Paare (x,y) mit $y \neq h(x)$ unterschiedlich gewichten (sprich: bestrafen).

(b) Sei $Y = \{0,1\}$, D eine Verteilung „nur“ über dem Beispielraum X. Wir erhalten auch das alte Fehlermodell wie folgt:

- Setze D auf $X \times \{0,1\}$ fort: Für die neue Verteilung D^* definiere

$$\text{prob}_{(x,y)\sim D^*}[(x,y] = \begin{cases} 0 & y = f(x), \\ \text{prob}_{x\sim D}[x] & y \neq f(x). \end{cases}$$

- Es ist

$$\text{Loss}_{D^*}(h) = \text{fehler}_D(h).$$

Der quadratische Loss und lineare Regression

Das einfache **lineare Regressionsproblem**:

- Experimentelle Beobachtungen $(x_1, y_1), \ldots, (x_s, y_s) \in \mathbb{R}^2$ liegen vor: Allerdings sind Meßwerte u. U. verfälscht.
- Es wird nach einem „linearen Zusammenhang“ zwischen den Größen x_i und y_i gesucht.
- Bestimme $a, b \in \mathbb{R}$ mit kleinem „Trainingsfehler“.
  - Setze $\ell((a, b), x, y) := (ax_i + b - y)^2$.
  - Der Trainingsfehler ist $\frac{1}{s} \cdot \sum_{i=1}^{s} (ax_i + b - y_i)^2$.
- Hoffentlich ist der erwartete Loss

$$\text{Loss}_D(a, b) := \mathbb{E}_{(x,y)\sim D}[(ax + b - y)^2]$$

klein.

Agnostische PAC-Algorithmen

Wir wollen alles, aber

$\mathcal{H}$ sei eine Konzeptklasse über X und Y

Ein Lernalgorithmus A ist genau dann ein

agnostischer PAC-Algorithmus

für $\mathcal{H}$ (und eine Loss-Funktion ℓ), wenn es

- für alle $\varepsilon \in (0, 1]$ und alle $\delta \in (0, 1]$
- eine Beispielzahl $s = s(\varepsilon, \delta)$ gibt,
- so dass A für alle Verteilungen D über X und Y,
  nach Erhalt von s Beispielen, eine Hypothese h bestimmt mit

$$\text{prob}_{(x,y)\sim D}[\overbrace{\mathbb{E}_D[\,\ell(h,x,y)\,] - \underbrace{\min_{g\in\mathcal{H}} \mathbb{E}_D[\,\ell(g,x,y)\,]}_{\text{Approximationsfehler von } \mathcal{H}}}^{\text{Schätzfehler von } h} \leqslant \varepsilon] \geqslant 1 - \delta.$$

Noch mal langsam ...

$$\text{prob}_{(x,y)\sim D}[\overbrace{\mathbb{E}_D[\,\ell(h,x,y)\,] - \underbrace{\min_{g\in\mathcal{H}} \mathbb{E}_D[\,\ell(g,x,y)\,]}_{\text{Approximationsfehler von } \mathcal{H}}}^{\text{Schätzfehler von } h} \leqslant \varepsilon\,] \geqslant 1-\delta.$$

- Der erwartete Loss $\mathbb{E}_D[\,\ell(h,x,y)\,]$ ist eine Zufallsvariable, denn
  - die Hypothese h hängt von den gezeigten Beispielen ab.
- Neue Perspektive:
  - Der **Approximationsfehler** ist eine Eigenschaft der Hypothesenklasse und lässt sich nicht ändern.
  - Wir sollten aber versuchen, den **Schätzfehler** klein zu halten.

Gibt es agnostische PAC-Algorithmen?

Empirischer Loss

(a) Für eine Menge $S \subseteq X \times Y$ von s klassifizierten Beispielen ist

$$\text{Loss}^S(h) := \frac{1}{s} \cdot \sum_{(x,y) \in S} \ell(h, x, y)$$

der **empirische Loss** (oder Trainingsfehler) für eine Loss-Funktion ℓ und die Beispielmenge S.

(b) Eine Hypothese $h \in \mathcal{H}$ ist eine **ERM-Hypothese bezüglich** ℓ auf S, wenn

$$\text{Loss}^S(h) = \min_{g \in \mathcal{H}} \text{Loss}^S(g).$$

Was wäre toll? Wenn sich empirischer Loss und wahrer Loss nur unwesentlich unterscheiden.

ε-repräsentative Beispielmengen

ε-repräsentative Beispielmengen (1/6)

$\mathcal{H}$ sei eine Hypothesenklasse über X und Y.

Eine Beispielmenge S ist

ε-repräsentativ

für $\mathcal{H}$, eine Loss-Funktion ℓ und eine Verteilung D über X und Y, falls

$$\left|\text{Loss}^S(h) - \text{Loss}_D(h)\right| \leqslant \varepsilon$$

für **alle** Hypothesen $h \in \mathcal{H}$ gilt.

- **Wenn** ε-repräsentative Beispielmengen hochwahrscheinlich sind,
- dann gilt $\text{Loss}^S(h) \approx \text{Loss}_D(h)$ hochwahrscheinlich.

Zeige: Für jede Verteilung D ist eine gemäß D zufällig ausgewählte Menge S von $s = s(\varepsilon, \delta)$ Beispielen

mit Wahrscheinlichkeit mindestens $1 - \delta$

ε-repräsentativ.

Zeige: $p := \text{prob}_D\left[\exists h \in \mathcal{H} : \left|\text{Loss}^S(h) - \text{Loss}_D(h)\right| \geqslant \varepsilon\right] \overset{!}{\leqslant} \delta.$

Für eine beliebige Hypothese $h \in \mathcal{H}$ ist

$$\mathbb{E}[\,\text{Loss}^S(h)\,] = \frac{1}{s} \cdot \sum_{(x,y)\in S} \mathbb{E}[\,\ell(h,x,y)\,] = \frac{1}{s} \cdot \sum_{(x,y)\in S} \text{Loss}_D(h) = \text{Loss}_D(h).$$

Gute Nachrichten:

Der wahre Loss ist der Erwartungswert des empirischen Loss.

Sind signifikante Abweichungen vom Erwartungswert relativ unwahrscheinlich, haben wir gewonnen!

1. Definiere die Zufallsvariable $X_i^h := \ell(h, x_i, y_i)$.
2. Fordere $0 \leqslant X_i^h \leqslant 1$ und damit $a_i := -1 \leqslant X_i^h - \mathbb{E}[X_i^h] \leqslant 1 =: b_i$.

Die Hoeffding-Ungleichung besagt

$$\begin{aligned} & \text{prob}\left[\left|\text{Loss}^S(h) - \text{Loss}_D(h)\right| \geqslant \varepsilon\right] \\ = \quad & \text{prob}\left[\left|\sum_{i=1}^{s}\left(X_i^h - \mathbb{E}[X_i^h]\right)\right| \geqslant \varepsilon \cdot s\right] \leqslant 2\exp^{-2s\varepsilon^2/4}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p &= \text{prob}_D\left[\exists h \in \mathcal{H} : \left|\text{Loss}^S(h) - \text{Loss}_D(h)\right| \geqslant \varepsilon\right] \\ &\leqslant \sum_{h\in\mathcal{H}} \text{prob}_D\left[\left|\text{Loss}^S(h) - \text{Loss}_D(h)\right| \geqslant \varepsilon\right] \\ &\leqslant |\mathcal{H}| \cdot 2\exp^{-2s\varepsilon^2/4} = 2|\mathcal{H}| \cdot \exp^{-s\varepsilon^2/2}. \end{aligned}$$

Wir müssen $p \overset{!}{\leqslant} \delta$ erreichen und die Forderung

$$2|\mathcal{H}| \cdot \exp^{-s\varepsilon^2/2} \leqslant \delta$$

ist zu erfüllen $\Longrightarrow$

$$s = \frac{2}{\varepsilon^2} \cdot \left(\ln(2|\mathcal{H}|) + \ln(\frac{1}{\delta})\right) \quad \text{Beispiele sind ausreichend.}$$

Sei $\mathcal{H}$ eine Hypothesenklasse mit endlich vielen Hypothesen und sei $\underbrace{\ell : \mathcal{H} \times X \times Y \to [0,1]}$ eine Loss-Funktion. Es gelte

Zu schwere Bestrafungen sind verboten

$$\underbrace{s(\varepsilon,\delta) = \frac{2}{\varepsilon^2} \cdot \left(\ln(2|\mathcal{H}|) + \ln(\frac{1}{\delta}) \right)}_{\text{Beispielzahl steigt um Faktor} \approx \frac{1}{\varepsilon} \text{ an}}.$$

1. Fordert man eine Menge S von $s(\varepsilon,\delta)$ Beispielen an und
2. bestimmt eine ERM-Hypothese $h \in \mathcal{H}$ bezüglich ℓ,
3. so erhält man einen agnostischen PAC-Algorithmus bezüglich ℓ.

Fazit

Ist die Beispielzahl genügend groß, dann sagt der Trainingsfehler einer ERM-Hypothese den Verallgemeinerungsfehler

hochwahrscheinlich

voraus und zwar simultan für alle Hypothesen.

Was bedeutet dies in Anwendungen?

Occam-Algorithmen

Occam's Razor

„Non sunt multiplicanda entia praeter necessitatem“.
In freier Übersetzung:

„Wähle stets eine möglichst einfache Erklärung“.

Was ist eine **einfache** Erklärung (bzw. Hypothese)?

Eine Erklärung, die zu einer Teilklasse $\mathcal{H}' \subseteq \mathcal{H}$ mit möglichst wenigen Freiheitsgraden gehört.

$(*)$ Hier weisen wir jeder Hypothese einen binären Namen zu.
Wir suchen eine ERM-Hypothese mit möglichst kurzem Namen.

Occam-Algorithmen (1/2)

Setup:

- Für $h \in \mathcal{H}$ sei länge(h) die Länge des binären Namens von h.
- $\mathcal{H}_r$: alle Hypothesen in $\mathcal{H}$ mit Namenslänge kleiner als r.

Für welche Beispielzahl $s_r(\varepsilon, \delta)$ erhalten wir einen PAC-Algorithmus, wenn wir eine konsistente Hypothese in $\mathcal{H}_r$ finden?

- Es ist $\mid \mathcal{H}_r \mid \leqslant \sum_{i=0}^{r-1} 2^i = 2^r - 1$.
- Sei $p_{s,r}$ die Wahrscheinlichkeit, dass es eine Hypothese $h \in \mathcal{H}_r$ gibt, die mit s Beispielen konsistent ist und einen Fehler $> \varepsilon$ hat.

Dann ist

$$p_{s,r} \leqslant (1-\varepsilon)^s \cdot \mid \mathcal{H}_r \mid \leqslant (1-\varepsilon)^s \cdot 2^r.$$

Occam-Algorithmen (2/2)

(1) Wir möchten $p_{s,r} \leqslant \delta$ erreichen und müssen fordern

$$(1-\varepsilon)^s \cdot 2^r \leqslant \delta.$$

(2) Nach Logarithmieren ist dies äquivalent zu:

$$s \cdot \ln(1-\varepsilon) + r \cdot \ln 2 \leqslant \ln \delta.$$

(3) Aber $\ln(1-\varepsilon) \leqslant -\varepsilon$ mit der Mutter aller Ungleichungen. Fordere

$$-s \cdot \varepsilon + r \cdot \ln 2 \leqslant \ln(\delta).$$

Wenn für

$$s_r(\varepsilon, \delta) = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(r \cdot \ln 2 + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right) \right)$$

Beispiele eine Hypothese h der Länge $< r$ gefunden wird,
dann hat h mit Wahrscheinlichkeit $\geqslant 1-\delta$ einen Fehler $\leqslant \varepsilon$.

Fazit: Occam-Algorithmen

Erfolgreiches Lernen für Hypothesenlänge $< r$ und

$$s = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(r \cdot \ln 2 + \ln \left(\frac{1}{\delta} \right) \right) \text{ Beispiele.}$$

Erfolgreiches Lernen, wenn die konsistente Hypothese wesentlich kürzer ist als die Anzahl der Beispiele:

$\Omega(\frac{r}{\varepsilon})$ Beispiele werden durch eine Hypothese der Länge höchstens r komprimiert.

Zusammenfassung: Endliche Hypothesenklassen

Fazit (1/2)

- Das Gütesiegel „hochwahrscheinlich kleiner Fehler“ kann bei

$$\Omega(\frac{1}{\varepsilon} \cdot (\ln(|\mathcal{H}|) + \ln(\frac{1}{\delta})))$$

  Beispielen an ERM-Hypothesen mit Fehler $\leqslant \varepsilon$ vergeben werden.
- Occam-Algorithmen erlauben eine Vergabe des Gütesiegels bei mgl. sehr kleiner Beispielmenge, aber sehr einfacher Hypothese.
- Eine ERM-Hypothese erhält das Gütesiegel in Gold („holt hochwahrscheinlich raus, was drin ist“) bei

$$\Omega\left(\frac{1}{\varepsilon^2} \cdot \left(\ln(|\mathcal{H}|) + \ln(\frac{1}{\delta})\right)\right)$$

  Beispielen: Schafft Verteilungen auf $X \times Y$ und Loss-Funktionen!

Fazit (2/2)

Ja, aber

- Werden so viele Beispiele auch tatsächlich benötigt?
  Kann man den Begriff *Freiheitsgrad* formalisieren?
- Lassen sich scharfen Aussagen über die Beispielzahl für reellwertige Hypothesenklassen wie etwa HALBRAUM$_n$ machen?
- Lassen sich ERM-Hypothesen effizient bestimmen?
- Modellieren wir Lern-Situationen in der Praxis?
  - Sind die in Anwendungen „gelieferten“ Beispiele „unabhängig“?
  - Warum wird Lernen „gegen“ **jede** Verteilung gefordert?

VC-Dimension und Freiheitsgrade

Wie misst man Freiheitsgrade?

Sei $\mathcal{C}$ eine Konzeptklasse.

(1) $\mathcal{C}$ *zertrümmert* eine Menge S von Beispielen, falls

$$\mathcal{P}(S) = \{S \cap c \mid c \in \mathcal{C}\}.$$

($\mathcal{P}(S) = \{T \mid T \subseteq S\}$ ist die Potenzmenge von S.)

(2) Die VC-Dimension $\mathrm{VC}(\mathcal{C})$ ist die maximale Mächtigkeit einer Menge S, die von $\mathcal{C}$ zertrümmert wird.

Wenn $\mathcal{C}$ die Menge S zertrümmert, dann erhalten wir jede Teilmenge von S als den Durchschnitt von S mit einem Konzept in $\mathcal{C}$:

Wenn $\mathcal{C}$ die Menge S zertrümmert, dann muss bei kleinem Fehler die Klassifikation eines jeden Beispiels in S bekannt sein!

Die Anzahl der Freiheitsgrade

Wir definieren $VC(\mathcal{C})$ als die Anzahl der Freiheitsgrade von $\mathcal{C}$.
Ist diese Definition vernünftig?

BOOLEAN$_n$ besitzt ein Konzept c_f für jede Boolesche Funktion $f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$:

$$c_f = \{x \in \{0,1\}^n \mid f(x) = 1\}.$$

- **BOOLEAN**$_n$ „sollte“ 2^n Freiheitsgrade besitzen, da der Wert von f auf jedem Argument $x \in \{0,1\}^n$ bestimmt werden muss.
- **BOOLEAN**$_n$ zertrümmert $\{0,1\}^n$, denn es gibt für jede Teilmenge $T \subseteq \{0,1\}^n$ ein Konzept $c \in$ **BOOLEAN**$_n$ mit $c = T$.
- Also ist VC(**BOOLEAN**$_n$) $= 2^n$.

Die Konzeptklasse RECHTECK$_n$

RECHTECK$_n$ besitzt für jedes achsenprallele Rechteck $R \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Konzept, das aus allen Punkten in R besteht.

(1) Die Anzahl der Freiheitsgrade von **RECHTECK$_2$** „sollte“ vier sein, denn jedes Rechteck wird durch die vier Koordinaten diagonal gegenüber liegender Eckpunke beschrieben.

(2) Die vier Punkte

$$e_1 = (-1, 0), \quad e_2 = (0, 1), \quad e_3 = (0, -1), \quad e_4 = (1, 0)$$

werden von RECHTECK$_2$ zertrümmert $\Longrightarrow$

$$\text{VC}(\text{RECHTECK}_2) \geqslant 4.$$

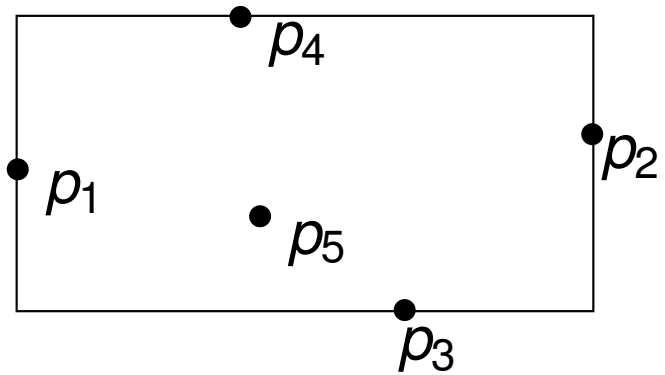
$\mathrm{VC}(\mathrm{RECHTECK}_2) = 4$

Wir zeigen $\mathrm{VC}(\mathbf{RECHTECK}_2) \leqslant 4$.

(1) Angenommen, $\mathbf{RECHTECK}_2$ zertrümmert die fünf Punkte p_1, p_2, p_3, p_4, p_5.

(2) p_1 und p_2 seien die Punkte mit minimaler (bzw. maximaler) x-Koordinate. p_3 und p_4 seinen die Punkte mit minimaler (bzw. maximaler) y-Koordinate.

(3) Dann kann die Teilmenge $T = \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$ aber nicht von p_5 getrennt werden!



HALBRAUM$_n$

Jedes Konzept in **HALBRAUM**$_n$ besteht aus allen Punkten $x \in \mathbb{R}$, die die Ungleichung $\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \geqslant t$ erfüllen.

HALBRAUM$_n$ „sollte“ $n+1$ Freiheitsgrade besitzen: Jedes Konzept wird durch die n Gewichte und den Schwellenwert beschrieben.

- **HALBRAUM**$_n$ zertrümmert die $n+1$ Punkte $0, e_1, \ldots, e_n$, wobei e_i der $i$te Einheitsvektor ist. Warum?
  - Sei $T \subseteq \{0, e_1, \ldots, e_n\}$ eine beliebige Teilmenge.
  - Wenn $0 \notin T$, wähle c als den Halbraum $\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \geqslant 1$ mit $w_i = 1$, wenn $e_i \in T$, und $w_i = -1$, wenn $e_i \notin T$.
  - Wenn $0 \in T$, dann arbeite mit den gleichen Gewichten, setze aber den Schwellenwert auf 0.
- Also ist VC(HALBRAUM$_n$) $\geqslant n+1$.

$\text{VC}(\text{HALBRAUM}_n) \leqslant n+1$ (1/2)

- Sei S eine Menge von $n+2$ Punkten.
- Wie beschafft man sich eine Teilmenge $T \subseteq S$, die nicht von ihrem Komplement $S \setminus T$ getrennt werden kann?

Der Satz von Radon

Für jede Menge $S \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $|S| \geqslant n+2$ gibt es eine nicht-leere Teilmenge $T \subset S$, so dass

$$\text{konvexe Hülle}(T) \cap \text{konvexe Hülle}(S \setminus T) \neq \emptyset.$$

Zum Beispiel: Vier Punkte im $\mathbb{R}^2$ besitzen stets eine Teilmenge T, die nicht von ihrem Komplement getrennt werden kann.

$\mathrm{VC}(\mathrm{HALBRAUM}_n) \leqslant n+1$ (2/2)

Angenommen, $\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \geqslant t$ für alle Punkte in T **und** $\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i < t$ für alle Punkte in $S \setminus T$.

(1) Setze

$$H_1 = \{ x \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \geqslant t \}, \quad H_2 = \{ x \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^{n} w_i x_i < t \}.$$

(2) Dann $H_1 \cap H_2 = \emptyset$.

(3) Aber $T \subseteq H_1$ und $S \setminus T \subset H_2$ nach Annahme.

(4) Wir erhalten einen Widerspruch zum Satz von Radon, denn H_1 und H_2 sind konvex.

$\mathrm{VC}(\mathrm{HALBRAUM}_n) \leqslant n+1$.

Kugeln und konvexe Polygone

(a) Die Konzeptklasse $\textbf{KUGEL}_d$ besitzt für jede Kugel

$$K_r(m) = \{y \in \mathbb{R}^d \,:\, \|x - m\| \leqslant r\}$$

in $\mathbb{R}^d$ ein Konzept. Es ist $\mathrm{VC}(\textbf{KUGEL}_d) = d + 1$.

(b) Die Konzeptklasse **k-GONS** ist die Klasse der konvexen Polygone in $\mathbb{R}^2$ mit *höchstens k* Ecken. Das Konzept besteht aus allen eingeschlossenen Punkten. Es ist $\mathrm{VC}(\textbf{k-GONS}) = 2k + 1$.

- Der Beweis wird in den Übungen behandelt.
- k-gons werden doch durch k Punkte mit jeweils zwei Koordinaten festgelegt?! (Aber *höchstens k* Ecken werden gefordert.)

Und dann sowas!

Für $a \in \mathbb{R}$ definieren wir das Konzept

$$\text{Sinus}(a) \subseteq \mathbb{R}$$

1. Es ist $x \in \text{Sinus}(a) :\Longleftrightarrow \lceil sin(a \cdot x) \rceil = 1$. (Wir setzen $\lceil -1 \rceil = 0$.)
2. Die Konzeptklasse $\mathfrak{S}$ besteht aus allen Konzepten Sinus(a).

$\mathfrak{S}$ wird durch einen Parameter beschrieben, aber

$$\text{VC}(\mathfrak{S}) = \infty.$$

Welche Sichtweise ist richtig: Kann man $\mathfrak{S}$ mit endlich vielen Beispielen lernen?

Einfache Eigenschaften der VC-Dimension

(a) Wenn $\mathcal{C}_1 \subseteq \mathcal{C}_2$, dann ist $\mathrm{VC}(\mathcal{C}_1) \leqslant \mathrm{VC}(\mathcal{C}_2)$.

(b) $\overline{\mathcal{C}} = \{ \overline{c} \mid c \in \mathcal{C} \}$ ist die Konzeptklasse der Komplemente von Konzepten in $\mathcal{C}$. Dann gilt $\mathrm{VC}(\mathcal{C}) = \mathrm{VC}\left(\overline{\mathcal{C}}\right)$.

(c) Für jede endliche Konzeptklasse $\mathcal{C}$ ist $\mathrm{VC}(\mathcal{C}) \leqslant \lfloor \log_2 |\mathcal{C}| \rfloor$.

Zu Teil (c):

- $(*)$ Angenommen, $\mathcal{C}$ zertrümmert eine Beispielmenge S.
- $(*)$ Dann gibt es zu jeder Teilmenge $T \subseteq S$ ein Konzept $c_T \in \mathcal{C}$ mit $T = S \cap c_T$.
- $(*)$ Also ist die Anzahl der Teilmengen von S höchstens so groß wie die Anzahl der Konzepte in $\mathcal{C}$.

$$\Longrightarrow 2^{|S|} \leqslant |\mathcal{C}| \Longrightarrow \mathrm{VC}(\mathcal{C}) \leqslant \lfloor \log_2 |\mathcal{C}| \rfloor.$$

Die VC-Dimension wichtiger Konzeptklassen

(a) $\mathrm{VC}(\text{MONOTON-MONOM}_n) = n$.

(b) $\mathrm{VC}(\text{MONOM}_1) = 2$ und $\mathrm{VC}(\text{MONOM}_n) = n$ für $n \geqslant 2$.

(c) $\binom{n}{k} \leqslant \mathrm{VC}(k\text{-KNF}_n) = \mathrm{VC}(k\text{-DNF}_n) \leqslant \binom{n}{k} \cdot 2^k$.

(d) $\mathrm{VC}(k\text{-KLAUSEL-KNF}_n) = \mathrm{VC}(k\text{-Term-DNF}_n) = \Theta(k \cdot n)$ für $k \leqslant 2^{n/2}$.

(e) $\mathrm{VC}(\text{BOOLEAN}_n) = 2^n$.

(f) $\mathrm{VC}(\text{SYM}_n) = n + 1$.

(g) $\mathrm{VC}(\text{AUTOMAT}_{n,\Sigma}) = \Theta(n \cdot |\Sigma| \cdot \log_2 n)$.

(h) $\mathrm{VC}(\text{RECHTECK}_n) = 2n$.

(i) $\mathrm{VC}(\text{HALBRAUM}_n) = n + 1$.

Die VC-Dimension von SYM_n

- Eine boolesche Funktion $f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$ heißt symmetrisch, wenn der Wert $f(x)$ nur von der Anzahl der Einsen in x abhängt.
- $\mathbf{SYM}_n$ besitzt für jede symmetrische Funktion f das Konzept $c_f = \{x \mid f(x) = 1\}$.
- Behauptung: $\mathrm{VC}(\mathrm{SYM}_n) = n + 1$.

- Die Anzahl der symmetrischen Funktionen f stimmt mit der Anzahl der Funktionen $g : \{0, \ldots, n\} \to \{0,1\}$ überein.
- $\Longrightarrow$ $|\mathrm{SYM}_n| = 2^{n+1}$ und $\mathrm{VC}(\mathrm{SYM}_n) \leqslant n + 1$ folgt.
- Der Vektor e_i habe Einsen in den Positionen $1, \ldots, i$ und sonst nur Nullen. Wir zertrümmern $S = \{e_0, \ldots, e_n\}$ mit $e_0 = 0$.
  - Für $T \subseteq S$ definiere die symmetrische Funktion f mit

$$f(e_i) = \begin{cases} 1 & e_i \in T \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

  - Dann ist $S \cap c_f = T$.

Konsistente Hypothesen: Untere Schranken für die Beispielzahl

Wieviele Beispiele sind notwendig: Intervalle

Die Konzeptklasse **INTERVALL** besteht aus allen Intervallen $I \subseteq [0,1]$. Wieviele Beispiele sind notwendig, um Intervalle mit Wahrscheinlichkeit $\geqslant 1-\delta$ und Fehler höchstens ε zu lernen?

- **INTERVALL** besteht aus überabzählbar unendlich vielen Konzepten. Unsere $\ln|\mathcal{C}|$-Schranke versagt völlig.
- Angenommen, unser Lernalgorithmus gibt das kleinste Intervall, das alle positiven Beispiele enthält, als Hypothese aus.

Übungen: Für die Gleichverteilung sind

$$s = \Omega(\frac{\ln(1/\delta)}{\varepsilon})$$

Beispiele notwendig, um das Zielkonzept $I = [0,1]$ zu lernen.

Eine weitreichende Verallgemeinerung (1/2)

Nenne eine Konzeptklasse $\mathcal{C}$ trivial, wenn $\mathcal{C}$ nur aus einem Konzept oder aus disjunkten Konzepten besteht.

(1) Wenn $\mathcal{C}$ nicht-trivial ist, dann gibt es zwei Beispiele $x \neq y$ und zwei Konzepte $c_1, c_2 \in \mathcal{C}$ mit

$$\{x, y\} \subseteq c_1 \text{ sowie } x \in c_2, y \notin c_2.$$

(2) Mache x hochwahrscheinlich (Wahrscheinlichkeit $1 - 2\varepsilon$) und y niedrigwahrscheinlich (Wahrscheinlichkeit 2ε).

(3) Ein deterministischer Lernalgorithmus irrt für entweder c_1 oder c_2, wenn Beispiel y nicht gesehen wird.

Lernalgorithmus sieht y nicht $\Longrightarrow$ Fehler $\geqslant 2\varepsilon$.

Eine weitreichende Verallgemeinerung (2/2)

(1) Es muss gewährleistet sein, dass der Algorithmus Beispiel y mit Wahrscheinlichkeit höchstens δ nicht sieht.

(2) Aber y wird mit Wahrscheinlichkeit $(1-2\varepsilon)^s = e^{-\Theta(\varepsilon \cdot s)}$ nicht gesehen.

(3) Wir müssen $e^{-\Theta(\varepsilon \cdot s)} \leqslant \delta$, bzw. $1/\delta \leqslant e^{\Theta(\varepsilon \cdot s)}$ fordern.

Für jede nicht-triviale Konzeptklasse $\mathcal{C}$ werden mindestens

$$\Omega(\frac{1}{\varepsilon} \ln(\frac{1}{\delta}))$$

Beispiele benötigt.

Wieviele Beispiele sind notwendig: Der allgemeine Fall

Es gelte $\mathrm{VC}(\mathcal{C}) = d + 1$ und $\mathcal{C}$ zertrümmere die Beispielmenge

$$S = \{x_0, \ldots, x_d\}$$

(1) S wird zertrümmert: Jede Teilmenge von S entspricht einem Konzept.

(2) Wir definieren eine schwierige Verteilung D auf den Beispielen:
- x_0 ist hochwahrscheinlich, und wird mit Wahrscheinlichkeit $1 - 4\varepsilon$ gewählt.
- Jedes andere x_i erhält die Wahrscheinlichkeit $4\varepsilon/d$.
- Beispiele außerhalb S erhalten die Wahrscheinlichkeit 0.

(3) x_0 wird sehr häufig gewählt: Wann sieht ein Lernalgorithmus genügend viele verschiedene klassifizierte Beispiele in S?

Wieviele Beispiele sind notwendig: Der allgemeine Fall

Wenn s Beispiele angefordert werden und wenn $d = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$:

(1) Die erwartete Häufigkeit von x_0 ist $s \cdot (1 - 4\varepsilon)$.

(2) Der Algorithmus sieht nur $s \cdot 4\varepsilon$ Beispiele aus $\{x_1, \ldots, x_d\}$.

(3) Angenommen $s \leqslant \frac{d}{8\varepsilon}$.

- Der Algorithmus sieht nur $d/2$ verschiedene Beispiele aus S.
- Die Klassifikation der nicht gesehenen Beispiele ist beliebig (denn S wird zertrümmert) und damit nicht prognostizierbar.
- Der Algorithmus muss die Klassifikation der nicht gesehenen $d/2$ Beispiele raten und wird sich für ein Zielkonzept irren.
- $\Longrightarrow$ der erwartete Fehler ist $\geqslant (d/2) \cdot (4\varepsilon/d) = 2\varepsilon$.

Mindestens

$$\Omega\left(\frac{\mathrm{VC}(\mathcal{C})}{\varepsilon}\right)$$

Beispiele müssen angefordert werden.

Zusammenfassung

Wir kombinieren die untere Schranke bei großer VC-Dimension mit der unteren Schranke für kleines δ:

Für jede nicht-triviale Konzeptklasse $\mathcal{C}$ sind mindestens

$$\Omega(\frac{1}{\varepsilon} \cdot \left[\mathsf{VC}(\mathcal{C}) + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right])$$

Beispiele notwendig bzw. der Fehler beträgt mindestens

$$\Omega(\frac{1}{s} \cdot \left[\mathsf{VC}(\mathcal{C}) + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right]).$$

Diese untere Schranke ist in vielen Fällen asymptotisch exakt!

Konsequenzen der unteren Schranke

Da $\Omega(\frac{1}{\varepsilon} \cdot (\mathrm{VC}(\mathcal{C}_n) + \ln(\frac{1}{\delta}))) = \text{Beispiel}(\mathcal{C}_n) = O(\frac{1}{\varepsilon} \cdot (\ln(|\mathcal{C}_n|) + \ln(\frac{1}{\delta})))$, kann die Beispielzahl exakt vorausgesagt werden, wenn

$$\mathrm{VC}(\mathcal{C}_n) = \Theta(\ln(|\mathcal{C}_n|)).$$

(a) $\text{Beispiel}(\text{MONOTON-MONOM}_n) = \Theta(\frac{n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(b) $\text{Beispiel}(\text{MONOM}_n) = \Theta(\frac{n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(c) $\text{Beispiel}(k\text{-KNF}_n) = \text{Beispiel}(k\text{-DNF}_n) = \Theta(\frac{n^k}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(e) $\text{Beispiel}(k\text{-KLAUSEL-KNF}_n) = \Theta(\frac{k \cdot n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(f) $\text{Beispiel}(k\text{-TERM-DNF}_n) = \Theta(\frac{k \cdot n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(g) $\text{Beispiel}(\text{BOOLEAN}_n) = \Theta(\frac{1}{\varepsilon} \cdot 2^n + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(h) $\text{Beispiel}(\text{SYM}_n) = \Theta(\frac{n}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$.

(i) $\text{Beispiel}(\text{AUTOMAT}_{n,\Sigma}) = \Theta(\frac{1}{\varepsilon} \cdot n \cdot \log_2 n + \frac{1}{\varepsilon} \cdot \ln\left(\frac{1}{\delta}\right))$ für $|\Sigma| = 2$.

No free Lunch

Gibt es universelle Lernalgorithmen?

Sei $X = \{0,1\}^n$.

- ? Warum wählen wir eine Hypothesenklasse a priori aus?
- ? Warum nicht Algorithmen bauen, die prinzipiell **jede mögliche** Hypothese als Antwort geben können?

Dann müssen wir mit der Hypothesenklasse BOOLEAN_n arbeiten, die für jede Teilmenge von $X = \{0,1\}^n$ ein Konzept besitzt.

No-Free-Lunch-Theorem

Der Lernalgorithmus A fordere weniger als $|X|/2$ Beispiele an $\Longrightarrow$
Es gibt ein Konzept $c \subseteq X$, eine Verteilung D, eine reelle Zahl $\mu > 0$, so dass für die von A bestimmte Hypothese h_c gilt:

$$\text{prob}[\,\text{fehler}_D(c, h_c) \geqslant \mu\,] \geqslant \mu.$$

Konsistente Hypothesen: Wieviele Beispiele genügen?

Das Ziel

Die Konzeptklasse $\mathcal{C}$ sei gegeben mit $\mathrm{VC}(\mathcal{C}) = d$. Dann gibt es einen PAC-Algorithmus für $\mathcal{C}$, der höchstens

$$\left\lceil \frac{4}{\varepsilon} \cdot \left(d \cdot \ln\left(\frac{12}{\varepsilon}\right) + \ln\left(\frac{2}{\delta}\right) \right) \right\rceil$$ Beispiele anfordert.

- Vollständig zertrümmerte Beispielmengen S sind **chaotisch**, denn jede Teilmenge kann als Konzept auftreten.
- Bei genügend vielen Beispielen werden aber (fast) alle Freiheitsgrade „gesetzt“, und wir haben kein Problem.

Was passiert, wenn der Algorithmus eine Beispielmenge S mit $s >> \mathrm{VC}(\mathcal{C})$ Beispielen sieht? Wie chaotisch ist S?

Das partielle Zertrümmern großer Beispielmengen

$\mathcal{C}$ zertrümmert eine Beispielmenge S mit $|S| = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$. Für größere Beispielmengen: Wieviele Teilmengen „produziert“ $\mathcal{C}$ höchstens?

- Für eine Beispielmenge S setze

$$\Pi_{\mathcal{C}}(S) := \{\, c \cap S \mid c \in \mathcal{C} \,\}.$$

- Für $s \in \mathbb{N}$ ist

$$\Pi_{\mathcal{C}}(s) := \max\{\, |\Pi_{\mathcal{C}}(S)| \mid |S| = s \,\}.$$

Sauer's Lemma

Für $d = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$ und jedes $s \in \mathbb{N}$ ist

$$\Pi_{\mathcal{C}}(s) \leqslant \sum_{i=0}^{d} \binom{s}{i}.$$

Für $s \geqslant d$ ist $\Pi_{\mathcal{C}}(s) \leqslant \left(\frac{e \cdot s}{d}\right)^d$.

Der (einfache) Beweis wird im Skript beschrieben.

Sauer's Lemma: Eine Diskussion (1/2)

Die Beispielmenge S sei gegeben und es gelte $d = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$.

(a) Wieviele Konzepte der Konzeptklasse $\mathcal{C}$ unterscheiden sich auf S?

- Genau $|\Pi_{\mathcal{C}}(S)|$ Konzepte, denn $\Pi_{\mathcal{C}}(S) = \{\, c \cap S \mid c \in \mathcal{C} \,\}$.
- Es gibt höchstens

$$\sum_{i=0}^{d} \binom{s}{i} \leqslant \left(\frac{e \cdot s}{d}\right)^{d}$$

Konzepte aus $\mathcal{C}$, die sich auf S voneinander unterscheiden.

(b) Wie scharf ist die obere Schranke in Sauer's Lemma?

- Für $s \leqslant d = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$ ist $\Pi_{\mathcal{C}}(s) = 2^s$, denn es gibt Beispielmengen der Größe s, die vollständig zertrümmert werden können.
- Sauer's Lemma ist exakt für $s \leqslant d$:

$$2^s = \Pi_{\mathcal{C}}(s) \leqslant \sum_{i=0}^{s} \binom{s}{i} = \sum_{i=0}^{s} \binom{s}{i} 1^i \cdot 1^{s-i} = (1+1)^s$$

denn $\binom{s}{i} = 0$ für $i > s$.

Sauer's Lemma: Eine Diskussion (2/2)

(c) Es gibt höchstens endlich viele verschiedene Konzepte „über S“, nämlich höchstens $(\frac{e \cdot s}{d})^d$ Konzepte.

- **Reine Spekulation** (?!):

  Und wenn wir die Schranke für endliche Konzeptklassen anwenden? Für geeignete Konstanten C, D folgt:

$$s \leqslant \frac{C}{\varepsilon} \cdot \left(d \cdot \ln(\frac{e \cdot s}{d}) + \ln(\frac{1}{\delta}) \right) \leqslant \frac{D}{\varepsilon} \cdot \left(d \cdot \ln(\frac{1}{\varepsilon}) + \ln(\frac{1}{\delta}) \right)$$

  Beispiele genügen.

- Genau das möchten wir zeigen!

ε-Netze

ε-Netze

Die Situation:

- Eine Beispielmenge S mit s Beispielen wurde zufällig gewählt.
- Das (unbekannte) Zielkonzept sei $c \in \mathcal{C}$ und D sei die Verteilung.
- **Gefahr**: Es gibt konsistentes Konzept $c' \in \mathcal{C}$ mit großem Fehler.
  - c' ist genau dann mit S konsistent, wenn $S \cap (c \oplus c') = \emptyset$.
  - Der Fehler ist zu groß, falls $\text{fehler}_D(c, c') > \varepsilon$.

Wir nennen

$$\Delta_\varepsilon(c) = \{ c \oplus c' \mid c' \in \mathcal{C} \text{ und } \text{fehler}_D(c, c') > \varepsilon \}$$

die Menge der **ε-Fehlerregionen** für c.

ε-Netze

Wir nennen eine Beispielmenge S ein ε-**Netz**, wenn

$$S \cap c^* \neq \emptyset$$

für jede ε-Fehlerregion $c^* \in \Delta_\varepsilon(c)$.

Angenommen, S ist ein ε-Netz und c' ist eine konsistente Hypothese mit zu großem Fehler:

- Dann ist $c \oplus c'$ eine ε-Fehlerregion $\Longrightarrow c \oplus c' \in \Delta_\varepsilon(c)$.
- Aber S ist ein ε-Netz $\Longrightarrow S \cap (c \oplus c') \neq \emptyset$.
- Es gibt ein $x \in S$ mit $x \in c \oplus c' \Longrightarrow c'$ ist nicht auf S konsistent. ↯

Ein konsistenter Lernalgorithmus ist ein PAC-Algorithmus, falls

$$\text{prob}[\text{ S ist ein } \varepsilon\text{-Netz }] \geqslant 1 - \delta.$$

Wahrscheinlichkeit eines ε-Netzes (1/2)

Sei A_s das Ereignis, dass eine Menge von s Beispielen **kein** ε-Netz ist. Was ist die Wahrscheinlichkeit von A_s?

$$\begin{aligned}
\text{prob}[\ A_s\ ] &= \text{prob}[\ \text{S ist } \textit{kein } \varepsilon\text{-Netz}\ ] \\
&= \text{prob}[\ \text{Es gibt ein } c^* = c \oplus c' \in \Delta_\varepsilon(c) \text{ und } S \cap c^* = \emptyset\ ] \\
&\leqslant \sum_{c^* \in \Delta_\varepsilon(c)} \text{prob}[\ S \cap c^* = \emptyset\ ]
\end{aligned}$$

Aber die Anzahl der Fehlerregionen in $\Delta_\varepsilon(c)$ kann sogar unendlich groß sein. So geht es leider nicht.

Wahrscheinlichkeit eines ε-Netzes (2/2)

Es ist

$$\text{prob}[\ A_s\ ] = \text{prob}[\ \text{Es gibt ein } c^* = c \oplus c' \in \Delta_\varepsilon(c) \text{ und } S \cap c^* = \emptyset\ ].$$

Wir definieren das Ereignis

$$B_s \equiv \exists c^* \in \Delta_\varepsilon(c) \left[c^* \cap S_1 = \emptyset \wedge |c^* \cap S_2| \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2} \right]$$

für Beispielmengen S_1, S_2 von jeweils s Beispielen.

B_s tritt ein, wenn eine schlechte Hypothese c' mit $c^* = c \oplus c'$

- $(*)$ nicht auf den ersten s,
- $(*)$ wohl aber auf den zweiten s Beispielen auffällt.

Das Ereignis B_s

(1) B_s tritt für (S_1, S_2) ein.
- die schlechte Hypothese c^* fällt auf S_1 nicht auf
- S_1 ist kein ε-Netz
- Ereignis A_s tritt für S_1 ein.

(2) Also folgt $\text{prob}[\ B_s\ ] = \text{prob}[\ B_s \mid A_s\ ] \cdot \text{prob}[\ A_s\ ]$.
- Eine schlechte Hypothese c^* sollte „wahrscheinlich“ auf S_2 inkonsistent sein $\Longrightarrow \text{prob}[\ B_s \mid A_s\ ]$ sollte groß sein.

Wenn $s \geqslant \frac{8}{\varepsilon}$, dann ist

$$\text{prob}[\ A_s\ ] \leqslant 2 \cdot \text{prob}[\ B_s\ ].$$

Der Beweis (via Chernoff-Schranke) wird im Skript beschrieben.

Zwischenfazit

(1) Unser Ziel ist der Nachweis, dass eine Menge von s Beispielen hoch-wahrscheinlich ein ε-Netz ist, falls s hinreichend groß ist.

(2) A_s ist das Ereignis, dass eine Menge von s Beispielen **kein** ε-Netz ist. Wir wissen, dass $\text{prob}[\, A_s \,] \leqslant 2 \cdot \text{prob}[\, B_s \,]$ mit

$$B_s \equiv \exists c^* \in \Delta_\varepsilon(c) \left[c^* \cap S_1 = \emptyset \wedge |c^* \cap S_2| \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2} \right].$$

(3) Zeige, dass B_s unwahrscheinlich ist.

(4) Für B_s ziehe eine Beispielmenge S von $2s$ Beispielen:

- Zuerst die s Beispiele aus S_1,
- dann die s Beispiele aus S_2.

- Beachte, dass $(c^* \cap S) \cap S_1 = c^* \cap (S \cap S_1) = c^* \cap S_1$ und $(c^* \cap S) \cap S_2 = c^* \cap (S \cap S_2) = c^* \cap S_2$.
- Ersetze c^* durch $c^* \cap S$.

Die Reduktion auf Sauer's Lemma (1/2)

(1) Wir fassen die **Einzelexperimente** (ziehe zuerst S_1, dann S_2) zu **Großexperimenten** S zusammen:
   - Ziehe zuerst S, dann zerlege S zufällig in S_1 und S_2.

(2) Fixiere ab jetzt das Großexperiment S.

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit

$$\text{prob}[\ B_s \mid S\ ]$$

des Ereignisses B_s, wenn wir das Großexperiment S durchführen?

$$\begin{aligned}
& \text{prob}[\ B_s \mid S\ ] \\
= \ & \text{prob}[\exists c^* \in \Delta_\varepsilon(c) : (c^* \cap S) \cap S_1 = \emptyset, \mid (c^* \cap S) \cap S_2 \mid \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2}\ ] \\
\leqslant \ & \sum_{c^* \cap S, c^* \in \Delta_\varepsilon(c)} \text{prob}[\ (c^* \cap S) \cap S_1 = \emptyset, (c^* \cap S) \cap S_2 \mid \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2}\ ].
\end{aligned}$$

Die Reduktion auf Sauer's Lemma (2/2)

Wie groß ist die Menge $\{c^* \cap S \mid c^* \in \Delta_\varepsilon(c)\}$?

(1) Die Menge $\Delta_\varepsilon(c)$ der Fehlerregionen ist eine Konzeptklasse.
- Dann ist $\Delta_\varepsilon(c) \subseteq c \oplus \mathcal{C}$
- und $\mathrm{VC}(\Delta_\varepsilon(c)) \leqslant \mathrm{VC}(c \oplus \mathcal{C}) = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$ folgt.

(2) Die Menge $\{c^* \cap S \mid c^* \in \Delta_\varepsilon(c)\}$ ist die Einschränkung der Konzeptklasse $\Delta_\varepsilon(c)$ auf die Beispielmenge S.

(3) Wende Sauer's Lemma für $d = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$ an:

$$|\{c^* \cap S \mid c^* \in \Delta_\varepsilon(c)\}| \leqslant \left(\frac{e \cdot s}{d}\right)^d.$$

Abschluss der Analyse (1/3)

Wie groß ist

$$\text{prob}[\ (c^* \cap S) \cap S_1 = \emptyset, (c^* \cap S) \cap S_2 \mid \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2}\ ]$$

für eine beliebige Fehlerregion c^*?

(1) Angenommen, $|c^* \cap S| = r$.

(2) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Auswahl von S_1 diese r Elemente auslässt?

- Genau 2^{-r}, denn jedes der r Beispiele in $c^* \cap S$ erscheint mit Wahrscheinlichkeit genau $\frac{1}{2}$ in S_2.

(3) Für uns ist aber nur der Fall $r \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2}$ interessant.

Es ist $\text{prob}[\ (c^* \cap S) \cap S_1 = \emptyset, (c^* \cap S) \cap S_2 \mid \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2}\ ] \leqslant 2^{-\frac{\varepsilon \cdot s}{2}}$.

Abschluss der Analyse (2/3)

$$
\begin{aligned}
& \text{prob}[\, B_s \mid S \,] \\
\leqslant & \sum_{c^* \cap S, c^* \in \Delta_\varepsilon(c)} \text{prob}[\, (c^* \cap S) \cap S_1 = \emptyset, (c^* \cap S) \cap S_2 \mid \geqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2} \,] \\
\leqslant & \left(\frac{e \cdot s}{d}\right)^d \cdot 2^{-\frac{\varepsilon \cdot s}{2}}.
\end{aligned}
$$

A_s war das Ereignis, dass eine Menge von s Beispielen **kein** ε-Netz ist.

Also folgt $\text{prob}[A_s] \leqslant 2 \cdot \text{prob}[B_s] \leqslant 2 \cdot \left(\frac{e \cdot s}{d}\right)^d \cdot 2^{-\frac{\varepsilon \cdot s}{2}}$.

Abschluss der Analyse (3/3)

Die Forderung $\text{prob}[A_s] \leqslant \delta$ führt auf

$$2 \cdot \left(\frac{e \cdot 2s}{d}\right)^d \cdot e^{-\frac{\varepsilon \cdot s}{2}} \leqslant \delta.$$

Jetzt logarithmiere

$$d \cdot \ln\left(\frac{2e \cdot s}{d}\right) - \frac{\varepsilon \cdot s}{2} \leqslant \ln\frac{\delta}{2}$$

und vertausche Terme

$$d \cdot \ln\left(\frac{2e \cdot s}{d}\right) + \ln\frac{2}{\delta} \leqslant \frac{\varepsilon \cdot s}{2}$$

Fordere $s = \frac{\alpha}{\varepsilon} \cdot (d \ln(\frac{1}{\varepsilon}) + \ln(\frac{1}{\delta}))$ für eine große Konstante α.

Zusammenfassung

Sei $\mathcal{C}$ eine Konzeptklasse mit $d = \mathrm{VC}(\mathcal{C})$.

(1) $s = \frac{\alpha}{\varepsilon} \cdot (d \ln(\frac{1}{\varepsilon}) + \ln(\frac{1}{\delta}))$ Beispiele genügen für ein erfolgreiches PAC-Lernen von $\mathcal{C}$, solange α hinreichend groß ist, aber

(2) $s = \frac{\beta}{\varepsilon} \cdot (d + \ln(\frac{1}{\delta}))$ Beispiele sind erforderlich, solange β hinreichend klein ist.

Konsequenzen:

- Die VC-Dimension formalisiert den Begriff „Freiheitsgrad“ für das PAC-Modell.
- Für endliche Konzeptklassen: $\mathrm{VC}(\mathcal{C}) = \Theta(\ln(|\mathcal{C}|)) \Longrightarrow$

$$s = \Theta(\frac{1}{\varepsilon} \cdot (\ln |\mathcal{C}_n| + \ln(\frac{1}{\delta})))$$

Beispiele sind hinreichend **und** notwendig.

Halbräume und Rechtecke

Es gibt Konstanten C_1, C_2 und D_1, D_2 mit

$$\frac{C_1}{\varepsilon} \cdot \left(n + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right) \leqslant \text{Beispiel}_{\text{RECHTECK}_n}(\varepsilon, \delta) \leqslant \frac{C_2}{\varepsilon} \cdot \left(n \cdot \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right).$$

$$\frac{D_1}{\varepsilon} \cdot \left(n + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right) \leqslant \text{Beispiel}_{\text{HALBRAUM}_n}(\varepsilon, \delta) \leqslant \frac{D_2}{\varepsilon} \cdot \left(n \cdot \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right).$$

Beispielkomplexität: Agnostische PAC-Algorithmen

Sei $\mathcal{H}$ eine Konzeptklasse mit $\mathrm{VC}(\mathcal{H}) = d$. Dann gilt für den 0-1 Loss:

(a) Es gibt eine Konstante C_1, so dass jeder ERM-Algorithmus, der mindestens

$$\frac{C_1}{\varepsilon^2} \cdot \left(d + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right)$$

Beispiele anfordert, ein agnostischer PAC-Algorithmus für $\mathcal{H}$ ist.

(b) Es gibt eine Konstante C_2, so dass jeder agnostische PAC-Algorithmus für $\mathcal{H}$ mindestens

$$\frac{C_2}{\varepsilon^2} \cdot \left(d + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right)$$

Beispiele anfordern muss.

Siehe Shalev-Shwartz und Ben-David.

PAC-Lernbarkeit

Die folgenden Aussagen sind äquivalent:

(a) $\mathrm{VC}(\mathcal{H}) < \infty$,

(b) $\mathcal{H}$ ist PAC-lernbar (mit ERM-Hypothesen),

(c) $\mathcal{H}$ ist agnostisch PAC-lernbar (mit ERM-Hypothesen).

Wie bitte? Ist die Konzeptklasse

Vereinigung von Intervallen

nicht lernbar?

Die algorithmische Komplexität

Das Konsistenzproblem

(a) Eine **parametrisierte** Konzeptklasse $\mathcal{C} = (\mathcal{C}_n)_{n\in\mathbb{N}}$ besteht aus Konzeptklassen $\mathcal{C}_n$ mit Beispielen der Länge höchstens n.

(b) Ein PAC-Algorithmus A für $\mathcal{C}$ ist **effizient**, wenn A für $\mathcal{C}_n$ höchstens $s = \mathrm{poly}(n, \frac{1}{\varepsilon}, \log_2(\frac{1}{\delta}))$ Beispiele anfordert und in Zeit $\mathrm{poly}(s)$ rechnet.

(1) Die wichtigsten Konzeptklassen besitzen eine in der Beispiellänge n polynomielle VC-Dimension:
Bis auf $\mathbf{BOOLEAN}_n$ genügen $s = \mathrm{poly}(n, \frac{1}{\varepsilon}, \log_2(\frac{1}{\delta}))$ Beispiele.

(2) Um eine gute Hypothese in Zeit $\mathrm{poly}(s)$ zu bestimmen, sollten wir insbesondere das **Konsistenzproblem**

> Gibt es eine konsistente Hypothese für eine Menge klassifizierter Beispiele?

in Zeit $\mathrm{poly}(s)$ lösen können.

Einfache Konzeptklassen

Die folgenden Konzeptklassen besitzen effiziente PAC-Algorithmen:

(a) MONOTON-MONOM,

MONOM,

k-DNF für fixiertes k,

k-KNF für fixiertes k,

k-TERM-DNF für fixiertes k (mit Hypothesenklasse $\mathcal{H} = k$-KNF),

k-KLAUSEL-KNF für fixiertes k (mit Hypothesenklasse $\mathcal{H} = k$-DNF),

(b) SYM,

(c) RECHTECK und

(c) HALBRAUM.

Boolesche Konzeptklassen (1/2)

(a1) **MONOTON-MONOM$_n$**:

- Das Monom

$$x_1 \wedge x_2 \wedge \cdots \wedge x_n$$

  ist die erste Hyothese.
- Streiche alle Variablen, die einem positiven Beispiel widersprechen.

(a2) **MONOM$_n$**:

- Das Monom

$$x_1 \wedge \neg x_1 \wedge x_2 \wedge \neg x_2 \wedge \cdots \wedge x_n \wedge \neg x_n$$

  ist die erste Hyothese.
- Streiche alle Literale, die einem positiven Beispiel widersprechen.

Boolesche Konzeptklassen (2/2)

(a3) **k-KNF**: In den Übungen.

(a4) **k-DNF**: In den Übungen

(a5) **k-TERM DNF**:

- Zu jeder **k-Term-DNF**-Formel gibt es eine äquivalente **k-KNF**-Formel.
- ACHTUNG: Wenn **k-TERM DNF** als Hypothesenklasse benutzt wird, dann ist das Konsistenzproblem NP-vollständig und effizientes Lernen ist unmöglich!

(a6) **k-KLAUSEL KNF**: Wie **k-TERM DNF**.

SYM und RECHTECK

(b) **SYM$_n$**:

- Wenn eine Funktion $f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$ symmetrisch ist und die Eingabe x genau i Einsen hat, dann ist $f(x) = f(1^i 0^{n-i})$.
- Die Hypothese akzeptiert Eingaben mit i Einsen genau dann, wenn es mindestens ein positives Beispiel mit i Einsen gibt.

(c) **RECHTECK$_n$**:

- Bestimme das kleinste Rechteck, das alle positiven Beispiele enthält.
- Wie? Für Beispiele $x_1, \ldots, x_s \in \mathbb{R}^n$ und jede Dimension j bestimme das Interval $I_j = [\min_{i=1}^{s} x_{i,j}, \max_{i=1}^{s} x_{i,j}]$.
- Setze $R = I_1 \times \cdots \times I_n$.

(d) **HALBRAUM$_n$**:

- $x_1, \ldots, x_r$ seien die positiven und $z_1, \ldots, z_t$ seien die negativen Beispiele.
- Stelle das folgende lineare Programm auf

$$\max \varepsilon \text{ so dass } \begin{array}{l} w^T \cdot x_i \geqslant t + \varepsilon \text{ für } i = 1, \ldots, r \\ w^T \cdot z_j \leqslant t - \varepsilon \text{ für } j = 1, \ldots, t. \end{array}$$

  Die Variablen des linearen Programms sind ε, der Schwellenwert t und die Komponenten des Vektors w.
- Das lineare Programm kann mit Interior Point Verfahren (oder mit dem Simplex Verfahren) effizient gelöst werden.

(e) $\wedge$-**HALBRAUM$_n$**: Alle Konzepte, die durch eine Konjunktion von zwei Threshold-Gattern berechnet werden.

Das Konsistenzproblem ist NP-vollständig,

Wie entscheidend ist das Konsistenzproblem?

Und wenn das Konsistenzproblem für $\mathcal{C}$ nicht effizient lösbar ist? Kann es trotzdem effiziente PAC-Algorithmen für $\mathcal{C}$ geben?

(1) Ja: wir zeigen später, dass das Konsistenzproblem für **k-TERM DNF** $\mathcal{NP}$-vollständig ist, aber **k-TERM DNF** kann effizient mit Hypothesenklasse **k-KNF** gelernt werden.

(2) Wenn das Konsistenzproblem für $\mathcal{C}$ NP-vollständig ist: Gibt es effiziente PAC-Algorithmen für $\mathcal{C}$ mit $\mathcal{C}$ als Hypothesenklasse?

Wahrscheinlich nicht: Wir konstruieren aus einem effizienten Lernalgorithmus *A* einen effizienten, randomisierten Algorithmus für das Konsistenzproblem.

Eine effiziente Lösung des Konsistenzproblems für $\mathcal{C}_n$

(1) Die klassifizierte Beispielmenge S sei vorgegeben. Wir müssen entscheiden, ob es ein mit S konsistentes Konzept in $\mathcal{C}_n$ gibt.

Setze $\varepsilon = \frac{1}{|S|+1}$ und $\delta = \frac{1}{2}$.

(2) Der PAC-Algorithmus A möge $s = s(\varepsilon, \delta) = \text{poly}(n)$ Beispiele anfordern. Erzeuge s Beispiele aus S gemäß der Verteilung

$$D(x) = \begin{cases} \frac{1}{|S|} & x \in S \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

(3) Sei h_c die von A ausgegebene Hypothese.
/* h_c ist eine effiziente Lösung des Konsistenzproblem für S mit Wahrscheinlichkeit mindestens $\frac{1}{2}$. */

(4) Wenn h_c konsistent ist, antworte „S ist konsistent mit einem Konzept in $\mathcal{C}$“ (**fehlerfrei**) und ansonsten „S hat kein konsistentes Konzept in $\mathcal{C}$“ (mgl. **falsch**).

PAC-Lernen von $\mathcal{C}$ mit Hypothesenklasse $\mathcal{C}$

Warum ist h_c eine effiziente Lösung des Konsistenzproblem für S mit Wahrscheinlichkeit mindestens $\frac{1}{2}$?

(1) Als PAC-Algorithmus erfüllt A

$$\text{prob}[\ \text{fehler}_D(c, h_c) \leqslant \frac{1}{|\ S\ | + 1}\ ] \geqslant \frac{1}{2},$$

(2) Wenn aber nur ein einziges Beispiel aus S missklassifiziert wird, dann ist $\text{fehler}_D(c, h_c) \geqslant \frac{1}{|S|} > \frac{1}{|\ S\ |+1}$.

- Unser Algorithmus ist fehlerfrei bei positiver Antwort.
- Eine negative Antwort ist mit Wahrscheinlichkeit $\leqslant \frac{1}{2}$ fehlerhaft.

Wenn das Konsistenzproblem für $\mathcal{C}$ NP-vollständig ist, dann gibt es vermutlich keine effizienten Algorithmen, die $\mathcal{C}$ mit $\mathcal{C}$ lernen.

3-Klausel-KNF: Schwieriges Lernen, wenn die Hypothesenklasse vorgegeben ist

Das Konsistenzproblem für 3-KLAUSEL-KNF

Das 3-Färbbarkeitsproblem

- Eingabe ist ein ungerichteter Graph $G = (V, E)$ mit Knotenmenge V und Kantenmenge E.
- Ist es möglich die Knoten mit drei Farben zu färben, so dass jede Kante nur verschieden gefärbte Knoten verbindet?

Das 2-Färbbarkeitsproblem ist effizient lösbar, das 3-Färbbarkeitsproblem ist hingegen NP-vollständig.

Konstruiere die polynomielle Reduktion

3-Färbbarkeit $\leqslant_p$ Konsistenz Problem für **3-KLAUSEL-KNF**.

Die Reduktion

Der ungerichtete Graph $G = (V, E)$ mit $V = \{1, \ldots, n\}$ sei die Eingabe für 3-Färbbarkeit.

Welche negativen, welche positiven Beispiele sollen wir wählen?

(1) Die Beispiele sind Belegungen aus $\{0,1\}^n$:
Bitposition v „entspricht“ dem Knoten v.
- Die Menge S_- der negativen Beispiele besteht aus allen Belegungen mit genau einer Eins.
- Die Menge S_+ der positiven Beispiele besteht aus allen Belegungen mit genau zwei Einsen, die einer Kante von G entsprechen.

(2) Die Beispielmenge ist $S = S_- \cup S_+$.

Zeige: G ist 3-färbbar $\Longleftrightarrow$

es gibt eine mit S konsistente 3-KLAUSEL-KNF.

Die Reduktion funktioniert (1/2)

Angenommen, der Graph G ist 3-färbbar mit der Färbung

$$\text{Farbe} : V \to \{1, 2, 3\}.$$

$c = k_1 \wedge k_2 \wedge k_3$ ist eine KNF mit den drei Klauseln

$$k_i \equiv \bigvee_{v \in V,\ \text{Farbe}(v) \neq i} x_v.$$

Frage: Ist c konsistent mit der Beispielmenge S?

(1) Jede Belegung x mit genau einer Eins verwirft c:

$x_v = 1 \Longrightarrow x$ falsifiziert die Klausel k_i (mit $i = \text{Farbe}(v)$).

(2) Jede Belegung, die einer Kante entspricht, akzeptiert c:

Denn u und v besitzen verschiedene Farben.

Die Reduktion funktioniert (2/2)

Angenommen die 3-KLAUSEL-KNF$_n$-Formel $c \equiv k_1 \wedge k_2 \wedge k_3$ ist konsistent mit der Beispielmenge S.

(1) Alle Belegungen x mit genau einer Eins (in Position v) verwerfen c:
- Es gibt mindestens eine Klausel $k_{f(v)}$, die für x falsch wird.
- Wähle $f(v) \in \{1, 2, 3\}$ als Farbe für Knoten v.

(2) f definiert eine 3-Färbung.

Warum verbinden Kanten nur verschieden gefärbte Knoten?
- Sei $\{u, v\}$ eine Kante von G.
- $f(u) = f(v) \Longrightarrow$ Klausel $k_{f(u)}$ enthält weder x_u noch x_v
- $\Longrightarrow$ die der Kante $\{u, v\}$ entsprechende Belegung verwirft c ↯

Das Konsistenzproblem für **3-KLAUSEL-KNF** ist NP-vollständig.

Sehr schwierige Konzeptklassen

- Die Konzeptklasse **3-KLAUSEL-KNF** ist nur schwierig, wenn **3-KLAUSEL-KNF** auch als Hypothesenklasse verwandt wird.
  - In den Übungen: **3-KLAUSEL-KNF** kann mit k-**DNF** (höchstens k Literale pro Monom) gelernt werden.
- Gibt es Konzeptklassen, die effizientes Lernen für **alle** potentiellen Hypothesenklassen verhindern?

Erfahrungsgemäß sehr schwierige Konzeptklassen sind

- **SCHALTKREISE**, sogar bei nur logarithmischer Tiefe.
- **NEURONALE NETZWERKE**, sogar bei kleiner Tiefe
- wie auch **ENDLICHE AUTOMATEN**.

Wir werden zeigen, dass wir das RSA-Kryptosystem brechen können, wenn wir eine dieser Konzeptklassen effizient lernen können.

Public-Key Kryptographie

- **Alice** und **Bob** möchten verschlüsselte Nachrichten über einen öffentlichen Kanal austauschen.
- **Eve** möchte die mitgehörten Nachrichten entschlüsseln.

Zur Verschlüsselung werden **Trapdoor-Funktionen** f_w eingesetzt:

- $f_w(x)$ soll einfach, $f_w^{-1}(y)$ schwierig zu berechnen sein.

Die Kommunikation:

(1) Alice wählt eine Trapdoor-Funktion f_w und veröffentlicht ein Programm zur Berechnung von f_w.

(2) Bob kodiert seine Nachricht x mit dem veröffentlichten Programm und veröffentlicht seinerseits $f_w(x)$.

(3) Alice kann $f_w(x)$ effizient dekodieren, da sie w kennt. Eve kennt w nicht und kann deshalb keine effiziente Dekodierung erreichen.

Lernen und Kryptographie

Das RSA-Kryptosystem

Das RSA-Kryptosystem von Rivest, Shamir und Adleman (1978) :

(1) Alice wählt zwei große Primzahlen p und q mit $p \neq q$, sowie den Kodierungsexponenten e. Sie veröffentlicht $N = p \cdot q$ und e.

(2) Bob kodiert eine Nachricht x (mit $1 \leqslant x < N$ und $\mathrm{ggT}(x, N) = 1$):

- Zuerst berechnet er (durch fortgesetztes Quadrieren)

$$x^{2^k} \bmod N,$$

für $k = 0, \ldots, \log_2 N$,

- danach

$$x^e \bmod N$$

durch Multiplikation der geeigneten Potenzen und veröffentlicht

$$f_{p,q,e}(x) = x^e \bmod N.$$

Alice kennt die Primfaktoren p und q und dekodiert $f_{p,q,e}(x)$. Wie?

Die Eulersche ϕ-Funktion

$\phi(N)$ ist die Anzahl der primen Restklassen modulo N, also

$$\phi(N) = |\{ x \in \{1, \ldots, N\} \mid \text{ggT}(x, N) = 1 \}|$$

.

- Welche Zahlen sind nicht teilerfremd zu N?
  - die p Vielfachen von q, d.h. $\{q, 2q, \ldots, (p-1)q, p \cdot q\}$
  - und die q Vielfachen von p, d.h. $\{p, 2p, \ldots, (q-1) \cdot p, q \cdot p\}$.
- $\phi(N) = p \cdot q - p - q + 1 = (p-1)(q-1)$.
- Alice kennt p und q und kann deshalb $\phi(N)$ leicht bestimmen.

Wie dekodiert Alice?

Der Satz von Euler

Für jede endliche Gruppe G mit Gruppenordnung m gilt

$$g^m \equiv 1$$

für alle $g \in G$.

(1) Bob sendet die Nachricht $y = x^e \mod N$.

(2) Alice bestimmt den Dekodierungsexponenten d so, dass

$$e \cdot d \equiv 1 \bmod \phi(N).$$

Sie arbeitet mit dem Euklidschen Algorithmus (für e und $\phi(N)$).

(3) Alice berechnet

$$y^d = (x^e)^d \equiv x^{ed} \equiv x^{1+k\cdot\phi(N)} \equiv x^1 \equiv x \bmod N.$$

Die Konzeptklasse **RSA**

(a) Die Parameter einer Konzeptklasse:
- $N = p \cdot q$ ist das Produkt zweier verschiedener Primzahlen p, q,
- $e \in \mathbb{Z}^*_{\phi(N)}$ ist der Kodierungsexponent und
- i ist eine Bitposition mit $1 \leqslant i \leqslant \lfloor \log_2 N \rfloor + 1$.

(b) Das Konzept $c_{N,e,i}$ besteht aus allen Vektoren

$$\left(N, e, x^e \bmod N, x^{e \cdot 2^1} \bmod N, \ldots, x^{e \cdot 2^{\lfloor \log_2 N \rfloor}} \bmod N \right),$$

so dass das $i$te Bit von x mit 1 übereinstimmt.

(c) Die Konzeptklasse $\mathbf{RSA}_n$ umfasst alle Konzepte $c_{N,e,i}$ mit RSA-Modulen N der Bitlänge höchstens n. Es ist

$$\mathbf{RSA}_n = \left\{ c_{N,e,i} \;\middle|\; \begin{array}{l} N \text{ ist RSA-Modul mit } 1 \leqslant N < 2^n, \\ e \in \mathbb{Z}^*_{\phi(N)} \text{ und } 1 \leqslant i \leqslant \lfloor \log_2 N \rfloor + 1 \end{array} \right\}.$$

Es ist $\mathbf{RSA} = (\mathrm{RSA}_n)_{n \in \mathbb{N}}$.

Die RSA Hypothese

Es gibt keinen probabilistischen Algorithmus A, so dass:

(a) Für jede Zahl $N = p \cdot q$ und jeden Exponenten $e > 1$ mit $\mathrm{ggT}(e, \phi(N)) = 1$ gilt

$$\mathrm{prob}\Big[\begin{array}{l} A \text{ berechnet zu gegebenen } N, e, x^e \bmod N \\ \text{das Urbild } x, \text{ sofern } x^e \in \mathbb{Z}_N^* \text{ und 0 sonst} \end{array} \Big] \geqslant \frac{3}{4},$$

wobei die Wahrscheinlichkeit über die internen Münzwürfe von A und die gleichverteilte Wahl von $x \in \{1, \ldots, N-1\}$ zu bilden ist.

(b) Algorithmus A läuft in Zeit $\mathrm{poly}(\log_2 N)$.

Die RSA-Hypothese „steht“ seit über 40 Jahren.

PAC Algorithmen für RSA

Angenommen, es gibt einen effizienten PAC-Algorithmus für **RSA**.

(1) Alice veröffentlicht ihre Kodierung (N, e).

(2) Eve knackt das RSA-Kryptosystem wie folgt:

- Eve bestimmt zufällig Zahlen $x_1, \ldots, x_s \in \{0, \ldots, N-1\}$ gemäß der Gleichverteilung und berechnet jeweils $y_i = x_i^e \bmod N$.
- Sie klassifiziert genau die Beispiele y_i als positiv für die x_j an der niedrigstwertigsten Position eine 1 hat und $\text{ggT}(x_j, N) = 1$ gilt.
- Die klassifizierten Beispiele werden einem PAC-Algorithmus (mit Fehler $\varepsilon = \frac{1}{n^2}$ und $\delta = \frac{1}{n^2}$) übergeben.

(3) Eve kann das niedrigstwertige Bit der Nachricht entschlüsseln. Sie wiederholt ihr Vorgehen für die verbleibenden Bits.

RSA-Hypothese $\Longrightarrow$ **RSA** besitzt keine effizienten PAC-Algorithmen, sogar, wenn eingeschränkt auf $D =$ Gleichverteilung.

Konsequenzen

(a) Die RSA-Hypothese möge gelten.

(b) $\mathcal{C} = (\mathcal{C}_n \mid n \in \mathbb{N})$ sei eine parametrisierte Konzeptklasse

(c) Für jedes $n \in \mathbb{N}$ möge es $m = \mathrm{poly}(n)$ geben, so dass alle Konzepte in RSA_n auch Konzepte in $\mathcal{C}_m$ sind.

$\Longrightarrow \mathcal{C}$ hat keine effizienten PAC-Algorithmen, selbst wenn als Verteilung D nur die Gleichverteilung benutzt wird.

Welche Konzeptklassen sind mächtig genug, um **RSA** zu enthalten?

LOG-SCHALTKREIS$_n$:

- Sei S ein $\{\wedge, \vee, \neg\}$-Schaltkreis mit Fanin höchstens zwei, Eingaben $x \in \{0,1\}^n$, Tiefe höchstens $\log_2 n$ und einem Ausgabegatter.
- **LOG-SCHALTKREIS**$_n$ enthält die von S berechnete boolesche Funktion als Konzept.

Wie einschneidend ist die Einschränkung auf logarithmische Tiefe?

LOG-SCHALTKREIS$_n$

RSA$_n \subseteq$ LOG-SCHALTKREIS$_{\mathrm{poly}(n)}$.

(1) Schaltkreise können n Binärzahlen $x_1, \ldots, x_n \in \{0,1\}^n$ in logarithmischer Tiefe $O(\log_2 n)$ miteinander multiplizieren.

(2) Wenn N **und** der Dekodierungsexponent d bekannt sind, dann kann in logarithmischer Tiefe

- überprüft werden, ob die Eingabe die Form

$$\left(N, e, y \bmod N, y^2 \bmod N, y^{2^2} \bmod N, \ldots, y^{2^{\lfloor \log_2 N \rfloor}} \bmod N\right)$$

- hat und die Nachricht x kann rekonstruiert werden:

$$x \equiv y^d \equiv y^{\sum_{i=0}^{k} d_i \cdot 2^i} \equiv \prod_{i,\ d_i = 1} y^{2^i} \bmod N.$$

Reverse Engineering für Schaltkreise ist selbst bei logarithmischer Tiefe äußerst schwierig. Und für Threshold-Schaltkreise **beschränkter Tiefe**?

THRESHOLD-SCHALTKREIS$_{t,n}$:

- Ein Schaltkreis S ist ein Threshold-Schaltkreis, wenn seine Gatter Threshold-Funktionen der Form

$$f(y_1, \ldots, y_m) = \begin{cases} 0 & \sum_{i=1}^{m} w_i \cdot y_i < t \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$$

berechnen.

- **THRESHOLD-SCHALTKREIS**$_{t,n}$ enthält für jeden Threshold-Schaltkreis der Tiefe t mit n Eingabe-, einem Ausgabegatter sowie höchstens n^2 Gattern

die von S berechnete boolesche Funktion als Konzept.

- Threshold-Schaltkreise können n Binärzahlen $x_1, \ldots, x_n \in \{0,1\}^n$ in Tiefe 5 mit poly(n) Gattern miteinander multiplizieren.

$\text{RSA}_n \subseteq$ **THRESHOLD-SCHALTKREIS**$_{7,m}$ für $m = \text{poly}(n)$.

Sind neuronale Netze effizient lernbar?

Die RSA-Hypothese gelte. Dann hat weder **LOG-SCHALTKREIS**$_n$ noch **THRESHOLD-SCHALTKREIS**$_{7,n}$ effiziente PAC-Algorithmen.

- Threshold-Schaltkreise mit sieben Schichten sind nicht effizient lernbar, egal mit welcher Hypothesenklasse.
- Neuronale (feedforward-)Netzwerke besitzen als Gattertypen
  - Threshold-Gatter,
  - reellwertige Gatter wie
    - ★ Rectifier: $r(x) = \max\{0, x\}$,
    - ★ die Softplus-Funktion: $f(x) = \ln(1 + \exp^x)$ oder
    - ★ das Standard-Sigmoid: $\sigma(x) = \frac{1}{1+\exp^{-x}}$.

Feedforward Netze beschränkter Tiefe sind mindestens so mächtig wie Threshold-Schaltkreise mit sieben Schichten.

Ein Grundgesetz

Ausdrucksstärke muss mit **ineffizientem** Lernen bezahlt werden.

$\Longrightarrow$ Lernverfahren für neuronale Netzwerke

- sind entweder sehr aufwändig oder
- kommen ohne jegliche Garantie.

Eine Familie von „**Mechanismen**“ $\mathcal{M}_{N,d_0\ldots d_k\ldots}$ ist zum Beispiel dann ausdrucksstark, wenn

$$\mathcal{M}_{N,d_0\ldots d_k\ldots}(y \mod N, \ldots, y^{2^k} \mod N, \ldots) = y^{\sum_k d_k 2^k} \mod N.$$

Sind endliche Automaten effizient lernbar?

Endliche Automaten haben,

wenn die Eingabe häufig genug wiederholt wird,

die Berechnungskraft von Schaltkreisen.

Sei S ein Schaltkreis der Tiefe $t = \log_2 n$.
Konstruiere einen DFA A_S mit $\text{poly}(2^t)$ Zuständen, der

$$\underbrace{x \cdots x}_{2^{t+1}-1 \text{ Mal}} = x^{2^{t+1}-1}$$

genau dann akzeptiert, wenn S die Eingabe x akzeptiert.

Schaltkreise: Eine Simulation durch DFAs

Das **Pebble-Spiel**:
Eine Schaltkreisauswertung mit möglichst wenigen Registern:

- Ein Pebble darf auf eine Quelle des Schaltkreises gesetzt werden
  - (das entsprechende Eingabebit wird in ein Register geladen)
- „Pebbel“ ein Gatter, wenn alle Vorgänger Pebbles besitzen
  - (werte das Gatter aus und lade Ergebnis in ein Register).

  Im gleichen Zug dürfen alle „Vorgänger-Pebbles“ gelöscht werden
  - (die entsprechenden Register werden wieder freigegeben).
- Ein Pebble darf jederzeit entfernt werden.

Sei S ein $\{\wedge, \vee, \neg\}$-Schaltkreis mit Fan-in höchstens 2 und Tiefe t:

? S kann mit $\leqslant t + 1$ Pebbles in Zeit $\leqslant 2^{t+1} - 1$ gepebbelt werden.

? Ein DFA mit poly(2^t) Zuständen kann S simulieren.

Beispielkomplexität und algorithmische Komplexität, eine Zusammenfassung

Das PAC-Modell: Beispielkomplexität

(a) Das PAC-Modell:

- Fairness Bedingung: Werte die Hypothese auf derselben Verteilung aus auf der Beispiele erzeugt wurden.
- Für Fehler $\leqslant \varepsilon$ mit Wahrscheinlichkeit $\geqslant 1 - \delta$ bei konsistenten Hypothesen:
  - ⋆ mindestens $\Omega(\frac{1}{\varepsilon} \cdot \left[\mathrm{VC}\left(\mathcal{C}\right) + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right])$ Beispiele sind erforderlich,
  - ⋆ höchstens $O(\frac{1}{\varepsilon} \cdot \left[\mathrm{VC}\left(\mathcal{C}\right) \cdot \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) + \ln\left(\frac{1}{\delta}\right)\right])$ Beispiele genügen.

$\Longrightarrow$ VC-Dimension $=$ Anzahl Freiheitsgrade.

(b) Agnostische PAC-Algorithmen müssen rausholen, was drin ist.

(c) Gute Lernalgorithmen bestimmen eine ERM-Hypothese.

- Beispielzahl $>>$ $\frac{\text{Parameterzahl}}{\varepsilon}$, bzw. $>>$ $\frac{\text{Parameterzahl}}{\varepsilon^2}$ $\Longrightarrow$ Lernerfolg.
- Occam Algorithmen suchen eine einfachste ERM-Hypothese.

Das PAC-Modell: Algorithmische Komplexität

(d) Schwierige Konzeptklassen.

- Repräsentationsabhängige Ergebnisse:
  - ⋆ **k-TERM DNF** kann nicht mit **k-TERM DNF** effizient PAC-gelernt werden, wohl aber mit Hypothesenklasse **k-KNF**.
  - ⋆ Wenn $\mathcal{C}$ der Durchschnitt von zwei Halbräumen ist, dann ist $\mathcal{C}$ nicht effizient mit $\mathcal{C}$ als Hypothesenklasse PAC-lernbar.
  - ⋆ Es gibt keine effizienten agnostischen PAC-Algorithmen für **MONOTON-MONOM** bzw. **HALBRAUM**.
- Repräsentationsunabhängige Ergebnisse: Weder
  - ⋆ **SCHALTKREIS**$_n$ noch
  - ⋆ neuronale feedforward Netze aus mindestens sieben Schichten noch
  - ⋆ endliche Automaten

  sind mit *irgendeiner* Hypothesenklasse effizient PAC-lernbar.

PAC-Modell: Eine Diskussion

+ Die Beispielauswahl wird durch Beispielverteilungen modelliert.
  - In „industriellen“ Anwendungen werden Millionen von Beispielen eingesetzt: Eine sorgfältige Auswahl ist nicht möglich.
? Ist die Annahme unabhängig voneinander gezogener Beispiele in Anwendungen gerechtfertigt?
- Erfolgreiches Lernen wird für *jede* Beispielverteilung gefordert.
  - In Anwendungen versucht, man das Lernen mit der der Auswahl der Beispiele zielgerichtet zu unterstützen.
+/- Wenige theoretische Ergebnisse über die Kombination von Hypothesenklasse und Beispielauswahl in Abhängigkeit von der zu lernenden Konzeptklasse.

Die Mutter aller Ungleichungen

Für jedes $x > -1$ gilt

$$e^{x/(1+x)} \leqslant 1 + x \leqslant e^x.$$

Darüberhinaus gilt $1 + x \leqslant e^x$ für alle $x \in \mathbb{R}$.

- Der natürliche Logarithmus ist eine konkave Funktion:
  Die Steigung der Sekante in den Punkten 1 und $1 + x$ ist
  - durch die Tangentensteigungen in den Punkten 1 nach oben
  - und $1 + x$ nach unten beschränkt.
- Als Konsequenz

$$\frac{1}{1+x} \leqslant \frac{\ln(1+x) - \ln(1)}{(1+x) - 1} = \frac{\ln(1+x)}{x} \leqslant 1.$$

- Jetzt exponentieren.

Die Chernoff-Schranke

(∗) $X_1, \ldots, X_n$ seien **unabhängige, binäre** Zufallsvariablen:
Jedes X_i nimmt also nur die Werte 0 oder 1 an.

(∗) X_i habe die „Erfolgswahrscheinlichkeit“ $p_i = \text{prob}[X_i = 1]$.

(∗) Dann ist $N = \sum_{i=1}^{n} p_i$ die erwartete Anzahl der Erfolge.

$$\text{prob}[\sum_{i=1}^{n} X_i > (1+\beta)\cdot N] \leqslant \left(\frac{e^{\beta}}{(1+\beta)^{1+\beta}}\right)^{N} \leqslant e^{-N\cdot\beta^2/3}$$

$$\text{prob}[\sum_{i=1}^{n} X_i < (1-\beta)\cdot N] \leqslant \left(\frac{e^{-\beta}}{(1-\beta)^{1-\beta}}\right)^{N} \leqslant e^{-N\cdot\beta^2/2}$$

für jedes $\beta > 0$ (bzw. $0 < \beta \leqslant 1$ im zweiten Fall).

Die Hoeffding-Ungleichung

$X_1, \ldots, X_n$ seien **unabhängige** Zufallsvariablen, so dass für alle i

$$a_i \leqslant X_i - \mathbb{E}[X_i] \leqslant b_i$$

mit Wahrscheinlichkeit 1 gelte. Dann folgt für alle $\epsilon > 0$

$$\text{prob}\left[\left|\sum_{i=1}^{n}\left(X_i - \mathbb{E}[X_i]\right)\right| \geqslant \varepsilon \cdot n\right] \leqslant 2\exp^{-\frac{2n^2\varepsilon^2}{\sum_{i=1}^{n}(b_i-a_i)^2}}.$$